

## **Verbale dell'Assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana del 21.02.2013.**

Il giorno giovedì 21 febbraio 2013, alle ore 18:00, presso l'Auditorium del Centro Culturale Altinate San Gaetano a Padova, in concomitanza con il Secondo Congresso Divisionale DCTC2013, ha inizio l'assemblea della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC), regolarmente convocata dal Presidente Prof. Gianfranco Pacchioni.

L'ordine del giorno risulta essere il seguente:

- 1) Comunicazioni del Presidente
- 2) Relazione sulle attività della Divisione
- 3) Bilancio consuntivo 2012 e preventivo 2013
- 4) Rinnovo cariche sociali
- 5) Varie ed eventuali

### **1) Comunicazioni del Presidente**

Il Presidente comunica che anche nel 2013 saranno proposti i due premi della Divisione: la Medaglia intitolata a Carla Roetti, premio riservato a ricercatori che non abbiano compiuto 40 anni alla scadenza del bando, e il Premio Scrocco, riservato a giovani ricercatori che non abbiano compiuto 33 anni alla scadenza del bando. La scadenza sarà fissata al 31 maggio 2013 per entrambi i premi. Per quanto riguarda le modalità di presentazione e la procedura di valutazione, si procederà come per l'Edizione 2012.

Il Presidente ricorda che il 27 settembre 2013 si terranno presso la Scuola Normale Superiore di Pisa gli Avogadro Colloquia, concepiti e promossi dal Presidente della SCI Prof. Barone e concordati con la Commissione Scientifica della SCI. I contributi saranno esclusivamente ad invito, e consisteranno in un contributo orale seguito da ampia discussione cui sarà riservato uno slot temporale adeguatamente lungo. Quest'anno gli Avogadro Colloquia saranno intitolati: "Challenges in Theoretical and Computational Chemistry in the framework of Horizon 2020". In concomitanza degli Avogadro Colloquia sarà convocata l'Assemblea Divisionale per la formalizzazione delle candidature alla cariche sociali (Presidenza e il Consiglio Direttivo) della DCTC.

Il Presidente infine informa l'Assemblea che è in corso il sondaggio sulle risorse di calcolo attraverso il sito web del congresso DCTC2013.

### **2) Relazione sulle attività della Divisione**

Il Presidente ricorda che la Divisione ha poco più di due anni, e in questo periodo si sono organizzati il primo incontro divisionale all'interno del Congresso SCI a divisioni unificate del 2011 a Lecce, e i due congressi divisionali del 2012 e 2013 a Pisa e Padova rispettivamente. Inoltre la Divisione ha promosso con convinzione i premi a giovani ricercatori: la Medaglia Carla Roetti a partire dal 2011 e il Premio Scrocco a partire dal 2012. Nel corso del congresso in corso (DCTC2013) saranno assegnati i premi dell'edizione 2012: il premio Roetti (medaglia, diploma e assegno di 1000 Euro generosamente offerto dalla famiglia Roetti) sarà assegnato alla prof. Chiara Cappelli, il premio Scrocco (targa e diploma) al Dott. Alfonso Pedone. Nell'ambito del premio Scrocco sarà anche attribuita una menzione speciale (diploma) al Dott. Claudio Greco.

### **3) Bilancio Consuntivo 2012 e Bilancio Preventivo 2013**

Il Presidente dà la parola al Prof. Stener, Tesoriere della Divisione, per illustrare il bilancio consuntivo 2012. Il Bilancio Consuntivo 2012 si chiude con un saldo (al netto dei residui) pari a 2118.08 Euro. Le entrate sono risultate pari a 3442.21 Euro, derivanti da 3142.21 Euro di utili del congresso DCTC2012 svoltosi a Pisa, e da 300 Euro relativi a pagamenti anticipati di quote di iscrizione al congresso DCTC2013 di Padova giunte sul c/c della divisione nel mese di dicembre

2012. Per quanto riguarda le uscite risultano 151,03 Euro di spese bancarie e 1000 Euro di versamento alla Sede centrale per il risanamento del bilancio SCI. Risultano infine 173.10 Euro di residui passivi, relativi alla fattura Gieffeci per la preparazione della Medaglia Roetti e la Targa Scrocco il cui pagamento è slittato al 2013. Il Presidente apre la discussione per eventuali chiarimenti, intervengono il Prof. Dovesi e il Prof. Barone. Il Presidente pone in votazione il Bilancio Consuntivo 2012 della DCTC, l'Assemblea approva all'unanimità.

Il Presidente da nuovamente la parola al Prof. Stener, Tesoriere della divisione, per illustrare il bilancio preventivo 2013. Il Bilancio Preventivo 2013 prevede un'unica voce in entrata, relativa agli utili del congresso DCTC2013 di Padova. Al momento risultano 103 iscrizioni sul sito web e sono giunti 60 pagamenti (pari a 6100 Euro) sul c/c DCTC. Inoltre è giunta la disponibilità da parte di HP a fornire un contributo al congresso pari a 1500 Euro e da parte di E4 pari a 1000 Euro. Quindi si prevede di raccogliere circa 8000 euro dalle iscrizioni che sommati agli sponsor si giunge a 10500 Euro. Le spese del congresso si prevede si aggirino intorno ai 6100 Euro quindi si può prevedere un saldo netto positivo di DCTC2013 pari a 4400 Euro. Considerato che 300 Euro di iscrizioni anticipate sono giunti in dicembre 2012 e quindi già contabilizzati nel bilancio consuntivo 2012, si giunge alla stima di 4100 Euro di entrate da DCTC2013 per il 2013. Per quanto riguarda le uscite, si stimano 200 Euro di spese bancarie, 2000 Euro di versamento alla Sede centrale per il risanamento del bilancio SCI e 350 Euro comprensivi del pagamento della fattura Gieffeci (residuo passivo 2012) e della Medaglia Roetti e Targa Scrocco edizione 2013. Il Presidente apre la discussione per eventuali chiarimenti. Non ci sono interventi. Il Presidente pone in votazione il Bilancio Preventivo 2013 della DCTC, l'Assemblea approva all'unanimità.

#### **4) Rinnovo cariche sociali**

Il Presidente ricorda che, come già detto nelle comunicazioni, in concomitanza agli Avogadro Colloquia (27 settembre 2013 presso la Scuola Normale a Pisa) sarà convocata l'Assemblea Divisionale per la formalizzazione delle candidature alle cariche sociali (Presidenza e il Consiglio Direttivo) della DCTC. Durante il Consiglio Direttivo del 5 febbraio 2013 si è ritenuto opportuno un parziale ricambio all'interno del direttivo, in modo da garantirne la continuità ma nel contempo anche un graduale rinnovamento. Al momento il Prof. Dario Duca e il Prof. Mauro Stener hanno dato la loro disponibilità a ricandidarsi anche per il triennio 2014 – 2016. Il Presidente invita tutti coloro che fossero interessati a candidarsi per la Presidenza o il Consiglio Direttivo a contattare direttamente il Presidente stesso oppure i membri del CD.

#### **5) Varie ed eventuali**

Il Presidente apre la discussione sulle prospettive del calcolo in Italia. In particolare ha fatto molto discutere l'accelerazione con cui è stata portata a termine la fusione del CILEA e del CASPUR con il CINECA, che invece di svolgersi in modo graduale nell'arco di un anno, come previsto, si è conclusa bruscamente nell'ottobre 2012, comunicando con breve preavviso che alcune macchine del CILEA sarebbero state dismesse il 7 dicembre 2012.

Interviene il Prof. Roberto Dovesi, come membro del Consiglio Scientifico del CINECA, che si occupa principalmente della selezione dei progetti ISCRA. Il Prof. Dovesi sottolinea le peculiarità di BGQ, la macchina di punta del CINECA, molto diversa dalla precedente IBM-SP6. BGQ prevede l'utilizzo di almeno 1024 core (pochi codici scalano bene fino a questo numero di processori); la trasferibilità dei codici risulta inoltre complessa, e ci sono stati nella fase di avvio (4-5 mesi) notevoli problemi legati alle librerie installate al CINECA. Dovesi informa che nell'ultima riunione del consiglio scientifico del CINECA è risultato che il numero dei progetti ISCRA accettabili non era tale da saturare completamente la macchina. Una possibile via per aggirare il problema della compatibilità di alcuni codici con BGQ consiste nell'utilizzare i progetti europei PRACE che permettono di accedere a grandi calcolatori, alcuni dei quali hanno architettura convenzionale.

Va osservato che in generale i grossi centri di calcolo prevedono di cambiare le macchine ogni 3-4 anni. Ora, osservato che il passaggio da SP6 a BGQ si è rivelato (si sta rivelando) traumatico (minimo 1024 core, poca memoria per core), ci si chiede quali siano i piani futuri del CINECA.

Circolano infatti voci secondo le quali dopo BGQ il CINECA potrebbe puntare su sistemi a GPU, il che comporterebbe un altro passaggio traumatico per la comunità Chimico Teorica.

Interviene il Prof. Barone, che fa presente come il Consiglio di Amministrazione del CINECA sia composto da 80 membri, considerata la numerosità del CdA ne consegue che di fatto le politiche vengano decise dalla Giunta, composta da solo 6 persone. Si ritiene opportuno costituire un gruppo di persone che prepari un documento e si faccia promotore presso il CINECA delle esigenze e le istanze da parte della comunità chimica computazionale, ad esempio promuovendo la costituzione di centri di calcolo regionali coordinati dal CINECA evitando l'omologazione in un unico paradigma di calcolo.

Intervengono il Prof. Dovesi che sottolinea l'importanza della formazione nel campo del calcolo e il Dott. Fortunelli che ricorda come il supporto tecnico fornito dal CINECA agli utenti in ambito chimico sia stato progressivamente smantellato negli ultimi anni, e come questo abbia pesato sulla disponibilità per gli utenti di codici di Chimica Teorica: ad oggi su BGQ non sono implementati in maniera efficiente nè codici DFT quali NWChem nè programmi di Dinamica Molecolare quali LAMMPS entrambi in linea di principio altamente parallelizzabili. Il Prof. Laganà ipotizza anche la possibilità che il CINECA possa mutare la propria mission e fa notare come anche il GARR abbia subito di recente una ristrutturazione improvvisa. L'Assemblea propone la costituzione di una commissione che prepari un documento piattaforma per la comunità dei chimici computazionali e si ponga come interfaccia tra tale comunità e il CINECA. Si rendono disponibili a farne parte Barone, Dovesi, Fortunelli e Laganà. L'Assemblea approva.

Infine il Prof. Polimeno relaziona brevemente sull'esito del sondaggio sul calcolo, che, pur ancora incompleto, mostra come la maggior parte degli utenti utilizzi risorse proprie oppure i grossi centri di calcolo nazionali (CINECA, ex-CASPUR ed ex-CILEA).

Non essendoci altro da discutere, l'Assemblea si conclude alle ore 19:45.

Padova, 21 febbraio 2013

Il Segretario  
Prof. Mauro Stener

Il Presidente  
Prof. Gianfranco Pacchioni