



ALLEGATO A

BANDO PUBBLICO PER LA SELEZIONE DI PROPOSTE PROGETTUALI, FINALIZZATE ALLA CONCESSIONE DI FINANZIAMENTI PER ATTIVITA' COERENTI CON IL NATIONAL CENTRE HPC, BIG DATA AND QUANTUM COMPUTING], A VALERE SULLE RISORSE DEL PIANO NAZIONALE RIPRESA E RESILIENZA (PNRR) MISSIONE 4, "ISTRUZIONE E RICERCA" - COMPONENTE 2, "DALLA RICERCA ALL'IMPRESA" - LINEA DI INVESTIMENTO 1.4, FINANZIATO DALL'UNIONE EUROPEA – NEXTGENERATIONEU" PROGETTO Centro Nazionale per HPC, Big Data e Quantum Computing (ICSC) Codice Identificativo CN00000013 SPOKE 7 MATERIALS & MOLECULAR SCIENCES, CUP B93C22000620006

Aree tematiche per la presentazione dei Progetti

Il presente Allegato descrive le aree tematiche definite per la prima tornata di Bandi a Cascata ICSC, relativi allo Spoke 7.

Spoke 7 – Consiglio Nazionale delle Ricerche

N. area	Area tematica	Dotazione Finanziaria (k€)	Dimensione minima (k€)	Dimensione massima (k€)	Vincoli
1	Attività di ricerca e sviluppo per la simulazione numerica su scala atomica o molecolare di nuovi materiali focalizzata sulle applicazioni tecnologiche pilota e sulla realizzazione di dimostratori funzionali al raggiungimento degli obiettivi dello Spoke 7.	1450	200	400	
2	Migrazione su architetture HPC innovative dei codici e delle applicazioni di simulazione numerica sviluppati dallo Spoke 7	250	50	100	
3	Progettazione e sviluppo di applicazioni informatiche HPC innovative per potenziare la fruibilità e le potenzialità dei software di simulazione sviluppati ed utilizzati nell'ambito dello Spoke 7, come ad esempio, interfacce-utente grafiche, servizi di cloud, etc.	400	50	200	
4	Sviluppo di metodologie, tecniche, e strumenti HPC per la modellizzazione di materiali e molecole anche di interesse farmaceutico con tecniche multi-scala, di intelligenza artificiale e di apprendimento automatico (machine learning), in coerenza con gli obiettivi dello Spoke 7.	600	100	250	
5	Sviluppo di metodologie, tecniche e strumenti per la gestione ed utilizzo di grandi moli di dati generati dalle simulazioni di materiali con i software prodotti o utilizzati nell'ambito dello spoke 7.	500	50	150	



Descrizione scientifica delle Tematiche

Tematica 1 - Attività di ricerca e sviluppo per la simulazione numerica su scala atomica o molecolare di nuovi materiali focalizzata sulle applicazioni tecnologiche pilota e sulla realizzazione di dimostratori funzionali al raggiungimento degli obiettivi dello spoke 7

Dotazione Finanziaria: 1.450.000 Euro

L'attività dovrà focalizzarsi sulla realizzazione di applicazioni pilota in grado di dimostrare l'efficacia delle metodologie teoriche e numeriche di simulazione su scala atomica e molecolare di materiali e sistemi molecolari sviluppate nell'ambito del programma scientifico dello Spoke 7 del Centro Nazionale HPC, Big Data e Quantum Computing, al fine di risolvere problemi di rilevante interesse scientifico e tecnologico.

Tematica 2 - Migrazione su architetture HPC innovative dei codici e delle applicazioni di simulazione numerica sviluppati dallo spoke 7

Dotazione Finanziaria: 250.000 Euro

L'attività dovrà focalizzarsi sulla migrazione verso sistemi di calcolo ad architettura ibrida basati su GPU di codici di simulazione numerica sviluppati ed utilizzati nell'ambito delle attività dello Spoke 7 del Centro Nazionale HPC, Big Data e Quantum Computing.

Tematica 3 - Progettazione e sviluppo di applicazioni informatiche HPC innovative per potenziare la fruibilità e le potenzialità dei software di simulazione sviluppati ed utilizzati nell'ambito dello spoke 7, come ad esempio, interfacce-utente grafiche, servizi di cloud, etc.

Dotazione Finanziaria: 400.000 Euro

L'attività dovrà focalizzarsi sullo sviluppo e sull'applicazione di software per la gestione di workflow complessi, interfacce-utente avanzate e servizi di gestione di risorse in cloud, per l'utilizzo ottimale dei codici di simulazione numerica di materiali e sistemi molecolari sviluppati ed utilizzati nell'ambito del programma di ricerca dello Spoke 7 del Centro Nazionale HPC, Big Data e Quantum Computing.

Tematica 4 - Sviluppo di metodologie, tecniche, e strumenti HPC per la modellizzazione di materiali e molecole anche di interesse farmaceutico con tecniche multi-scale, di intelligenza artificiale e di apprendimento automatico (machine learning), in coerenza con gli obiettivi dello Spoke 7.

Dotazione Finanziaria: 600.000 Euro

L'attività dovrà focalizzarsi sullo sviluppo e sull'applicazione di tecniche multiscala per la modellizzazione di materiali e sistemi molecolari, con particolare enfasi sulla messa a punto di potenziali di interazione, sia su scala atomica che *coarse-grained*, utilizzando anche metodi di apprendimento automatico. L'attività potrà anche prevedere lo sviluppo ed applicazione di metodi di intelligenza artificiale per la progettazione e preselezione (*screening*) di materiali e sistemi molecolari innovativi, anche in ambito farmaceutico. Le attività proposte dovranno essere coerenti con il programma scientifico del Centro Nazionale HPC, Big Data e Quantum Computing.

Tematica 5 - Sviluppo di metodologie, tecniche e strumenti per la gestione ed utilizzo di grandi moli di dati generati dalle simulazioni di materiali con i software prodotti o utilizzati nell'ambito dello spoke 7. Le metodologie e gli strumenti prodotti dovranno ottemperare a quanto previsto dai principi FAIR.

Dotazione Finanziaria: 500.000 Euro

L'attività dovrà focalizzarsi sullo sviluppo e sull'applicazione di tecniche avanzate di gestione (immagazzinamento, recupero, ricerca) di grandi moli di dati generati dalle simulazioni numeriche condotte nell'ambito del programma di ricerca dello Spoke 7 del Centro Nazionale HPC, Big Data e Quantum Computing. Le metodologie e gli strumenti prodotti dovranno ottemperare a quanto previsto dai principi FAIR.