

## PROTOCOLLO DI ACCORDO TRA

**Il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie (DCBB) dell'Università di Perugia e  
Il Dipartimento di Ingegneria Civile e Ambientale (DICA) dell'Università di Perugia**

### PREMESSO che

- a) è in essere un Protocollo di Accordo del 30/10/2015 tra il **DCBB** e la **PLC System S.r.l. (PLC)** di Acerra (Allegato), nell'ambito progetto di Dottorato Europeo **ITN-EJD-642294. TCCM (*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*)** di cui è Responsabile Scientifico il Prof. Antonio Laganà;
- b) nell'ambito del suddetto progetto di Dottorato Europeo **ITN-EJD-642294. TCCM (*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*)** il **DCBB** (Via Elce di Sotto 8, Perugia), qui rappresentato dal suo Direttore Prof. Francesco Tarantelli e dal Prof. Antonio Laganà, in qualità di Responsabile Scientifico del progetto, è beneficiario principale e sovrintende al progetto di ricerca "**Calcolo in rete per la modellistica ab initio dell'immagazzinamento chimico di energie alternative**" dell' **Early-Stage Researcher (ESR)** Carles Marti;
- c) il citato ESR dovrà condurre la propria ricerca presso il DCBB per un periodo di 20 mesi operando sull'apparato sperimentale PROGEO, attualmente installato presso la **PLC System** sita in Zona ASI- Località Pantano, 80011 Acerra (Napoli), trascorrendo un periodo di stage di tre mesi presso la stessa PLC systems;
- d) in virtù del Protocollo di Accordo di cui al punto (a), al fine di facilitare sin dall'inizio tale attività, il **DCBB** e la **PLC System** hanno concordato che l'apparato PROGEO sia collocato presso un'ideale struttura dell'Ateneo di Perugia;
- e) il **DICA** (Via G.Duranti 93, Perugia), qui rappresentato dal suo Direttore Prof. A.L. Materazzi e dal responsabile scientifico Prof. Stefano Falcinelli, ha competenze e strutture atte ad ospitare il suddetto apparato PROGEO, individuate di concerto con il Prof. Laganà, ed opera in settori didattici e tematiche di ricerca affini alle attività oggetto del progetto dell'ESR.

### SI CONCORDA CHE

- a) il **DICA** ospiti PROGEO in propri idonei spazi interni o esterni, individuati di concerto con il Prof. Laganà, assumendo la completa responsabilità dell'adeguato alloggio e sicura custodia dell'apparecchiatura; il **DICA** darà dettagliata comunicazione al **DCBB** e a **PLC Systems** dei locali individuati per l'alloggiamento di PROGEO; rimane ferma la responsabilità dell'utilizzatore per danni provocati a terzi, alla struttura ospitante o alla stessa apparecchiatura dovuta a mancanza di prudenza, diligenza e perizia nell'utilizzo della strumentazione stessa. A tale proposito il **DICA** conserverà un apposito registro nel quale verranno annotati i nominativi degli utenti e le date delle sessioni di utilizzo. Gli utenti autorizzati sono vincolati a compilare tale registro prima di effettuare qualunque sessione di utilizzo, manutenzione o semplice ispezione del suddetto apparato. Rimane in carico al costruttore la responsabilità per danni provocati a terzi, alla struttura ospitante o alla stessa apparecchiatura per effetto di difetti costruttivi della stessa;
- b) il personale del **DICA** e del **DCBB** elencato nell'Allegato abbia accesso a PROGEO e collabori nell'uso dell'apparato, sotto la supervisione del responsabile scientifico Prof. Stefano Falcinelli e previa compilazione del registro di cui al punto (a);
- c) eventuali interventi di manutenzione e/o modifica di PROGEO siano a carico del **progetto ITN-EJD-642294**, compresi gli interventi iniziali da effettuare per garantire il corretto funzionamento del suddetto apparato (come la realizzazione del sistema di adduzione dell'acqua di raffreddamento, di quello di alimentazione elettrica dalla cabina ENEL al box esterno ospitante PROGEO e la realizzazione di un sistema di chiusura a chiave del box

# VIRT&L-COMM.8.2015.7

ospitante PROGEO che impedisca l'accesso all'apparecchiatura al personale non autorizzato);

- d) escluso quanto previsto nel presente atto, il **DCBB** rimane responsabile per ogni adempimento al quale si sia obbligato per effetto della stipula del Protocollo di Accordo tra lo stesso e **PLC**, di cui al punto (a) sopracitato nelle premesse del presente Protocollo.

Perugia, data 20/11/2015

**Direttore Dip. di Ing. Civile e Ambientale**

**Direttore Dip. di Chimica, Biol. e Biotecnologie**

**Prof. Annibale Luigi Materazzi**

**Prof. Francesco Tarantelli**

**Responsabile scientifico DICA**

**Responsabile scientifico DCBB**

**Prof. Stefano Falcinelli**

**Prof. Antonio Laganà**

## ALLEGATO 2

PROGETTO DI DOTTORATO EUROPEO ITN-EJD-642294. TCCM (*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*)

### Calcolo in rete per la modellistica ab initio dell'immagazzinamento chimico di energie alternative

**Obiettivi:** utilizzazione estensiva di calcoli distribuiti per simulazioni ab initio di processi chimici (struttura elettronica, dinamica dei nuclei, stima dell'efficienza degli scambi di massa e di energia) concernenti l'utilizzazione di applicazioni gestite dal workflow GEMS (Grid Empowered Molecular Simulator) che combina l'uso di Calcolo ad alte prestazioni (HPC, High Performance Computing) e ad alto flusso di calcoli (HTC, High Throughput Computing) [1]. Le applicazioni considerate sono finalizzate alla simulazione dei processi di immagazzinamento di energie alternative sotto forma di CH<sub>4</sub> ottenuto grazie alla riduzione della CO<sub>2</sub> [2]. Durante il lavoro di tesi l'ESR (Early Stage Researcher) fruitore della borsa del progetto verrà addestrato a sviluppare il relativo software concorrente per piattaforme innovative e a comporre le relative procedure computazionali assemblando programmi della organizzazione virtuale COMPCHEM [3].

**Risultati attesi:** il gruppo di Perugia fornirà all'ESR sia i necessari accessi all'infrastruttura Grid sia le competenze di base per poter utilizzare efficientemente le risorse computazionali. L'impegno verrà esteso allo sviluppo di linee di collaborazione con le relative organizzazioni virtuali, il porting dei codici relativi e l'utilizzazione delle potenzialità delle piattaforme di calcolo eterogenee distribuite [3,4].

Il gruppo di Tolosa contribuirà al progetto mediante studi di teorici della struttura elettronica dei sistemi molecolari coinvolti con particolare riferimento alla necessità di progettare e implementare formati standard (sia pure di fatto) per i dati prodotti dai differenti programmi ab initio e la loro estensione ai calcoli dinamici [5]. Per questo motivo l'ESR inizierà il proprio percorso formativo presso il gruppo di Perugia e vi resterà per i primi 20 mesi. I restanti 16 mesi li spenderà invece a Tolosa.

**Mobilità:** Nel corso dei 20 mesi passati a Perugia l'ESR fruirà di uno stage di 3 mesi presso la PLC System per accedere all'apparato sperimentale su cui testare le caratteristiche sperimentali e teoriche del progetto

#### Riferimenti

- [1] C. Manuali, A. Costantini, A. Laganà, M. Cecchi, A. Ghiselli, M. Carpenè, E. Rossi, Lecture Notes Computer Science 7333 (2012) 345-357.
- [2] E. Garcia, A. Saracibar, A. Laganà, Theor. Chem. Accounts. 128 (2011) 727-734.
- [3] A. Laganà, A. Riganelli, O. Gervasi, Lecture Notes in Computer Science 3980 (2006) 665-674.
- [4] C. Manuali, A. Laganà, Future Generation of Computer Systems, 27 (2011) 315-318.
- [5] E. Rossi et al., J. Comp. Chem. 35 (2014) 611-621

Planned secondment: Three months in PLC System to have access to a prototype apparatus on which testing experimental and theoretical features of the project.