

All. 1 – Piano delle attività

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca (*eventuale*):

Il progetto si propone come naturale prosecuzione delle ricerche recenti sull'inverse design molecolare basato su approcci computazionali avanzati. In particolare, i lavori precedenti hanno dimostrato da un lato l'efficacia di modelli generativi data-free basati su reinforcement learning accoppiato a calcoli di chimica quantistica per l'esplorazione efficiente dello spazio chimico, e dall'altro il potenziale di algoritmi quantistici variazionali (QEVO) per affrontare problemi combinatori complessi nella progettazione molecolare. Su queste basi, il progetto mira a sviluppare un framework ibrido che integri metodi di reinforcement learning classico con tecniche di ottimizzazione quantistica, con l'obiettivo di migliorare ulteriormente l'efficienza, la scalabilità e la qualità delle molecole generate. L'idea centrale è mantenere la purezza dei modelli *data-free*, capaci di esplorare spazi chimici senza *bias* da dataset preesistenti, e sfruttare le nuove tecniche di AI e le capacità degli algoritmi quantistici di rappresentare e campionare distribuzioni complesse in spazi ad alta dimensionalità. Lo scopo del progetto si estende all'esplorazione di tali distribuzioni non solo in ambito chimico ma anche in altri ambiti scientifici (in qualunque settore in cui è richiesta la soluzione di problemi combinatoriali ad alta dimensionalità).

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca (*eventuale*) in inglese:

The project is conceived as a natural continuation of recent research on molecular inverse design based on advanced computational approaches. In particular, previous works have demonstrated, on the one hand, the effectiveness of data-free generative models based on reinforcement learning combined with quantum chemistry calculations for the efficient exploration of chemical space, and, on the other hand, the potential of variational quantum algorithms (QEVO) to tackle complex combinatorial problems in molecular design. Building on these foundations, the project aims to develop a hybrid framework that integrates classical reinforcement learning methods with quantum optimization techniques, with the goal of further improving the efficiency, scalability, and quality of the generated molecules. The core idea is to preserve the purity of data-free models—capable of exploring chemical spaces without biases from pre-existing datasets—while leveraging recent advances in AI and the ability of quantum algorithms to represent and sample complex distributions in high-dimensional spaces. The scope of the project extends beyond the chemical domain to the exploration of such distributions in other scientific fields, particularly in any area requiring the solution of high-dimensional combinatorial problems.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico:

Le attività del progetto si concentreranno su: l'estensione dei (i) framework generativi data-free esistenti e dei (ii) moduli quantistici o quantistico-ispirati; (iii) lo sviluppo di strategie di ottimizzazione ibride che combinino tecniche avanzate di intelligenza artificiale e quantum computing per esplorare in modo efficiente spazi di soluzione ad alta dimensionalità; e (iv) la validazione dell'approccio proposto in diversi ambiti applicativi, dalla progettazione molecolare (ad esempio drug discovery e scienza dei materiali) ad altre classi di problemi combinatori complessi, dimostrandone la generalità e la scalabilità.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico in inglese:

The project activities will focus on: (i) extending existing data-free generative frameworks and (ii) quantum or quantum-inspired modules; (iii) developing hybrid optimization strategies that combine advanced artificial intelligence techniques and quantum computing to efficiently explore high-dimensional solution spaces; and (iv) validating the proposed approach across different application domains, from molecular design (e.g., drug discovery and materials science) to other classes of complex combinatorial problems, demonstrating its generality and scalability.

• Piano delle attività:

- Analisi dello stato dell'arte su modelli generativi data-free e algoritmi quantistici/quantistico-ispirati
- Definizione dell'architettura di un framework ibrido per l'inverse design
- Estensione e ottimizzazione di modelli generativi basati su reinforcement learning con calcoli on-the-fly
- Sviluppo e implementazione di moduli quantistici e quantistico-ispirati
- Integrazione tra tecniche di AI avanzata, reinforcement learning e quantum computing
- Sviluppo di strategie di ottimizzazione ibride per l'esplorazione di spazi ad alta dimensionalità
- Validazione del framework su problemi di progettazione molecolare (drug discovery, materiali fotoattivi)
- Estensione e applicazione a problemi combinatori complessi in altri domini scientifici
- Analisi delle prestazioni in termini di efficienza, qualità e scalabilità
- Disseminazione dei risultati e rilascio di strumenti/software sviluppati

• Piano delle attività in inglese:

- State-of-the-art analysis of data-free generative models and quantum/quantum-inspired algorithms
- Definition of the architecture of a hybrid framework for inverse design
- Extension and optimization of reinforcement learning-based generative models with on-the-fly calculations
- Development and implementation of quantum and quantum-inspired modules
- Integration of advanced AI techniques, reinforcement learning, and quantum computing
- Development of hybrid optimization strategies for exploring high-dimensional solution spaces
- Validation of the framework on molecular design problems (e.g., drug discovery, photoactive materials)
- Extension and application to complex combinatorial problems in other scientific domains
- Performance analysis in terms of efficiency, quality, and scalability
- Dissemination of results and release of developed tools/software

• Quantificazione figurativa delle attività annue, ai fini della rendicontazione dei costi sui progetti di ricerca:

1720 ore annue

1500 ore annue (nel solo caso in cui sia previsto da specifiche iniziative di finanziamento, es. FIS, PNRR, ...)

2) Criteri di valutazione, definiti sulla base di quanto stabilito all'art. 10 del Regolamento

<p>a) coerenza del titolo di studio per l'accesso alla selezione con il progetto oggetto del bando (<i>consistency of additional qualifications with the project covered by the call for applications</i>) fino ad un massimo di 25 punti</p>	<p>La commissione valuta l'attinenza del titolo di laurea magistrale o a ciclo unico conseguito da non più di sei anni, specificando se pienamente, parzialmente o non attinente, graduando il relativo giudizio e punteggio.</p> <p><i>(The committee evaluates the relevance of the Master's degree (Laurea Magistrale or single-cycle degree) obtained no more than six years ago, specifying whether it is fully, partially, or not relevant, and assigning the corresponding assessment and score)</i></p>
<p>b) coerenza di ulteriori titoli di studio con il progetto oggetto del bando (<i>consistency of additional qualifications with the project covered by the call for applications</i>) fino a un massimo di 10 punti</p>	<p>La commissione ritiene valutabili i seguenti ulteriori titoli: dottorato di ricerca</p> <p>La commissione valuta l'attinenza per ciascun titolo, specificando se pienamente, parzialmente o non attinente, graduando il relativo giudizio e punteggio</p> <p><i>(The committee considers the following additional qualification as eligible for evaluation: PhD.</i></p> <p><i>The committee assesses the relevance of each qualification, specifying whether it is fully, partially, or not relevant, and assigns the corresponding evaluation and score.)</i></p>
<p>c) le pubblicazioni presentate in termini di originalità, innovatività, rigore metodologico, rilevanza e congruenza con il progetto oggetto del bando. La Commissione prende in considerazione esclusivamente pubblicazioni o testi accettati per la pubblicazione secondo le norme vigenti, nonché saggi inseriti in opere collettanee ed articoli editi su riviste in formato cartaceo o digitale con l'esclusione di note interne o rapporti dipartimentali (<i>the publications submitted in terms of originality, innovativeness, methodological rigour, relevance and congruence with the project covered by the call for applications. The Committee will only take into consideration publications or texts accepted for publication in accordance with the applicable regulations, as well as any essays included in collective works and articles published in journals in paper or digital format with the exclusion of internal notes or departmental reports</i>) fino a un massimo di 10 punti</p>	<p>La commissione valuta nel suo insieme i criteri riferiti alle pubblicazioni presentate, specificando se originali, metodologicamente rigorose, rilevanti, congruenti con il settore oggetto del bando e graduando il relativo giudizio e punteggio.</p> <p><i>The committee evaluates as a whole the criteria related to the submitted publications, specifying whether they are original, methodologically rigorous, relevant, and consistent with the field covered by the call, and assigning the corresponding assessment and score.</i></p>

<p>d) altri titoli collegati ad attività precedentemente svolte (es: borse di studio, partecipazione in qualità di relatore a convegni e congressi, conseguimento di premi e riconoscimenti per attività di ricerca, tirocini e stage formativi, ecc.) debitamente attestati (other qualifications related to previous activities (e.g. <i>scholarships, participation as a speaker at conferences and congresses, receipt of prizes and awards for research activity, internships and training periods, etc.</i>) duly certified) fino a un massimo di 15 punti</p>	<p>La commissione valuta le seguenti tipologie di attività precedentemente svolte:</p> <p>Assegni di ricerca o borse post-dottorali (max 6 punti)</p> <p>Partecipazione in qualità di relatore a convegni e congressi (max 6 punti)</p> <p>Conseguimento di premi e riconoscimenti per attività di ricerca (max 3 punti)</p> <p><i>(The committee evaluates the following types of previously carried out activities:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>Research fellowships or postdoctoral grants (max 6 points)</i> • <i>Participation as a speaker at conferences and congresses (max 6 points)</i> • <i>Receipt of awards and recognitions for research activities (max 3 points)</i> <p>)</p>
--	--

Criteria di valutazione per il colloquio, che terrà conto anche degli aspetti motivazionali e attitudinali, nonché della capacità di esposizione e di sintesi (*Criteria for the interview, which will take also into account the candidate's motivation and aptitude, as well as their ability to present and summarize information*):

- *maturità scientifica: la maturità scientifica sarà valutata sulla base dell'esposizione del proprio percorso formativo e professionale;*
- *scientific maturity: Scientific maturity will be assessed based on the presentation of the candidate's educational and professional background.*
- *preparazione dei candidati: la preparazione dei candidati sarà valutata sulla base di quesiti, anche in merito al proprio percorso formativo e professionale, volti ad indagare la conoscenza della materia oggetto del bando nonché la capacità di creare collegamenti fra argomenti inerenti.*
- *preparation of the applicants: The candidates' preparation will be assessed through questions, including those related to their educational and professional background, aimed at evaluating their knowledge of the subject matter of the call as well as their ability to establish connections between related topics.*