

## UZASADNIENIE ZAKUPU KLASTRA OBLICZENIOWEGO DLA WFIA

**Wykaz wraz z opisem badań naukowych lub prac rozwojowych oraz innych zadań, do których niezbędna jest planowana inwestycja, w tym ich znaczenie dla rozwoju międzynarodowej współpracy w zakresie nauki i techniki:**

Obliczenia numeryczne, w tym symulacje komputerowe złożonych zjawisk fizycznych, wymagają ogromnej mocy obliczeniowej. Jednym ze sposobów na ich przeprowadzenie jest użycie komputerów dużej mocy, w centrach obliczeniowych. Jesteśmy użytkownikami takich centr, jednakże wstępne przygotowanie kodów obliczeniowych, ich walidacja, badania wstępne i próbne symulacje wymagają dostępu ciągłego i krótkich czasów oczekiwania na wyniki. Dlatego niezbędne jest posiadanie lokalnego serwera obliczeniowego o sporej mocy, który pozwoli na swobodny dostęp dla pracowników.

Ze względu na szeroki zakres badań z różnych dziedzin fizyki teoretycznej i komputerowej, poniżej podzieliliśmy opis na kilka części związanych z osobnymi tematami:

### 1. Analiza danych produkcji hadronów termicznych ze zderzeń ciężkich jonów.

Dzięki zwiększonym zasobom obliczeniowym możliwym będzie kompleksowe potraktowanie oddziaływań hadronowych w ramach podejścia tzw. sprzężonych kanałów (ang. coupled-channel framework), co z kolei pozwoli na analizę wyników termicznej produkcji hadronów w eksperymentach zderzeń ciężkich jonów w LHC.

### 2. Rozwiązanie złożonych równań Dysona-Schwingera.

Tu poszukujemy możliwości uzyskania wiarygodnych rozwiązań sprzężonych równań całkowych wyprowadzonych jako obcięcie układu równań Dysona-Schwingera motywowanych chromodynamiką kwantową (QCD). Uzyskany wynik będzie następnie powiązany z symulacjami dużej skali w kontekście astrofizyki.

### 3. Badania nad oscylacjami neutrin.

Planujemy zbadać oscylacje neutrin i efekt materii w nadchodzących eksperymentach neutrinowych. Badania będą oparte na zaawansowanych obliczeniach numerycznych i użyciu klastra komputerowego. Wytworzone i szczegółowo przeanalizowane będą oscylogramy neutrinowe. Realizacja prezentowanego projektu będzie niezbędna do prawidłowej interpretacji danych empirycznych i głębszego zrozumienia fizyki cząstek elementarnych.

### 4. Generator Monte Carlo NuWro.

Rozwijanie generatora Monte Carlo NuWro, który pozwala symulować oddziaływania neutrin z jądrami atomowymi w zakresie energii charakterystycznych dla eksperymentów oscylacyjnych długiej i krótkiej bazy. Symulacje Monte Carlo wymagają dostępu do dużej mocy obliczeniowej oraz są czasochłonne. Generator NuWro jest wykorzystywany przez międzynarodowe eksperymenty neutrinowe, takie jak T2K, Minerva, w analizie pomiarów oscylacyjnych. Oprogramowanie to jest powszechnie znane i stosowane w środowisku neutrinowym.

### 5. Teoretyczne modelowanie oddziaływań neutrin z nukleonami i jądrami atomowymi.

Badane modele są na tyle skomplikowane, że aby otrzymać jakiekolwiek przewidywania należy przeprowadzić zasobo- i czasochłonne obliczenia numeryczne.

Zadania 5. i 6. dają bezpośredni wkład do studiów oddziaływań neutrin z nukleonami i jądrami w zakresie energii charakterystycznym dla eksperymentów oscylacyjnych. Stąd, pośrednio, prace te dają wkład do badań eksperymentalnych oscylacji neutrin.

## 6. Badania nad zastosowaniem metod głębokiego uczenia w rozwiązywaniu problemów fizycznych

W szczególności chodzi o badanie własności materiałów porowatych, prac dotyczących tzw. Physics Informed Neural Networks oraz wykorzystania modeli uczenia maszynowego w symulacjach Monte Carlo oddziaływań neutronów z jądrami atomowymi. Wszystkie wymienione zadania dotyczą zagadnień, które cieszą się powszechnym zainteresowaniem fizyków na całym świecie.

## 7. Teoria informacji kwantowej i optyka kwantowa

Jak zauważyli Schrodinger oraz Einstein, Podolsky i Rosen, mechanika kwantowa wykazuje dość zaskakującą własność, kwestionującą kompletność tej teorii. Własność ta dopuszcza istnienie stanów globalnych dla układu złożonego, które nie mogą być zapisane jako iloczyn stanów poszczególnych podukładów. W konsekwencji kwantowo-mechaniczny opis świata pozwala na istnienie korelacji pomiędzy przestrzennie oddzielonymi podukładami, które zasadniczo różnią się od ich klasycznych odpowiedników.

Uważa się, że korelacje kwantowe mogą zrewolucjonizować wiele dziedzin nauki i technologii. Liczba sugerowanych zastosowań stanów kwantowych stale rośnie w ciągu ostatnich kilkudziesięciu lat, głównie za sprawą szybkiego rozwoju technologii kwantowych, zwłaszcza związanych z kwantowym przetwarzaniem informacji i kwantową komunikacją. Procesy te wykorzystują zasadniczo nowe sposoby obliczania i komunikacji oparte na prawach fizyki mechaniki kwantowej zamiast fizyki klasycznej. Gwarantuje to absolutnie bezpieczną komunikację, obiecuje ogromną moc obliczeniową przekraczającą możliwości jakiegokolwiek klasycznego komputera i jest bezpośrednio powiązany z pojawiającymi się technologiami kwantowymi, takimi jak na przykład czujniki oparte na kwantach. O ogólnoświatowym zainteresowaniu tym tematem świadczy niedawny znaczny wzrost finansowania kwantowej technologii informacyjnej.

Jednak efektywne wykorzystanie korelacji kwantowych we wspomnianych protokołach informacyjnych wymaga narzędzi pozwalających badać korelacje tak jakościowo, jak i ilościowo. Przez lata problem ten był intensywnie analizowany, dostarczając różnych koncepcji teoretycznych, choć zwykle opartych o nietrywialne wymagania eksperymentalne. Na przykład, wiele proponowanych metod wymaga pewnej wstępnej wiedzy na temat macierzy gęstości analizowanego stanu, której nigdy nie można uzyskać doświadczalnie bez trudności technicznych.

Wynika to z faktu, że tzw. tomografia kwantowa opiera się na wyidealizowanej sytuacji, która wymaga powtarzania pomiarów na dużym zespole niezależnych i identycznych kopii stanu kwantowego. W sytuacjach, gdy dostępna jest tylko niewielka liczba instancji danego zasobu kwantowego, należy szukać rozwiązań m.in. w technikach losowego pobierania próbek w celu niezawodnego detekcji korelacji kwantowych. Zaletą takich metod jest prostota analizy danych, ponieważ wymagana jest minimalna uprzednia wiedza o globalnej populacji.

W ramach projektu rozwijane będą metody do analizy i charakterystyki różnych form korelacji kwantowych poprzez pomiary przeprowadzone w odpowiednich/realistycznych warunkach eksperymentalnych. W tym celu zamierzamy wykorzystać zaawansowane metody numeryczne (uczenie maszynowe, metody programowania liniowego). Przykładowo, będziemy badać ograniczenia kwantowo wspomaganego uczenia maszynowego w inżynierii kwantowych optycznych układów wielopoziomowych oraz platform symulatorów kwantowych. Dodatkowo potrzebne są symulacje numeryczne rzeczywistych procesów fizycznych (z dziedziny optyki kwantowej) do optymalizacji i weryfikacji wyników analitycznych. Wszystkie te procesy wymagają znaczących mocy obliczeniowych.

Praktyczna implementacja kwantowych protokołów informacyjnych poza laboratorium naukowym jest obecnie jednym z głównych tematów badań z zakresu teorii informacji kwantowej i optyki kwantowej. Wyniki naszego projektu wniosą zatem wkład w wiedzę potrzebną do rozwoju technologii kwantowych, ujawniając potencjał stanów kwantowych do zastosowań w realistycznych warunkach.

8. Z użyciem klastra obliczeniowego planujemy też zbadać i zrozumieć zachowania przepływów o wysokiej liczbie Reynoldsa ( $Re$ ) w ośrodkach porowatych, takich jak skały, filtry i gleby. Do tego musimy użyć narzędzi korzystających z zaawansowanych metod i obliczeń numerycznych. Zadanie obejmuje badanie złożonych interakcji między przepływem płynu a porowatymi strukturami, biorąc pod uwagę różne parametry, takie jak prędkość przepływu, porowatość, przepuszczalność i krętość. Badania wykorzystują zaawansowane techniki obliczeniowe, w tym bezpośrednią symulację numeryczną (DNS), do modelowania i analizy dynamiki przepływu.

Aby uruchomić bezpośrednią symulację numeryczną (DNS) przepływu turbulentnego w ośrodkach porowatych na superkomputerze, należy uzyskać wstępne rozwiązania, które również potrzebują znacznej mocy obliczeniowej, dlatego niezbędne jest posiadanie sprzętu, który pozwoli na przeprowadzenie badań wstępnych w dużej skali.

9. Komputerowe symulacje równań hydrodynamiki gęstych cieczy wieloskładnikowych.

10. Dynamika czasoprzestrzeni w pętlowej grawitacji kwantowej i jej uproszczenia

Spójna synteza ogólnej teorii względności i fizyki kwantowej jest kluczowym elementem potrzebnym do zrozumienia większości ekstremalnych zjawisk fizycznych, jak ewolucja wczesnego Wszechświata czy fizyka wnętrz czarnych dziur. Jedną z bardziej znanych prób takiej unifikacji jest tzw. Pętlowa Grawitacja Kwantowa (LQG). Jednym z jej przewidywań jest dyskretność podstawowych wielkości geometrycznych (obserwablów), takich jak powierzchnie i objętości, co może implikować znaczące zmiany w fizyce przy najwyższych (Planckowskich) energiach. Ze względu na poziom komplikacji teorii, uzyskanie solidnych przewidywań dynamicznych jest poza bardzo uproszczonymi, niefizycznymi przykładami niezwykle trudne. Problem ten doprowadził do stworzenia uproszczonych sformułowań, z uproszczeniami sięgającymi od modyfikacji (grawitacyjnej) grupy cechowania (jak zredukowana LQG -- rLQG) do zastosowania metod LQG do bardzo symetrycznych (kosmologicznych) klas czasoprzestrzeni opisanych przez skończone stopnie swobody - tak zwana Pętlowa Kosmologia Kwantowa (LQC).

W ramach tej ostatniej, badanie dynamiki wczesnego Wszechświata poprzez model izotropowego Friedmanna-Lemaître'a-Robertsona-Walkera umożliwiło zmianę obowiązującego paradygmatu kosmologii. Mianowicie, ze względu na efekty dyskretności czasoprzestrzeni, rozszerzający się Wszechświat, zamiast rozpoczynać się w osobliwości Wielkiego Wybuchu, wyłonił się z wcześniejszego kurczącego się poprzez proces kwantowego odbicia (big bounce). Późniejsze badania obejmujące bardziej skomplikowane, a jednak wciąż niezwykle uproszczone opisy czarnych dziur i kolapsu materii, pokazały iż podobny proces zachodzi wewnątrz czarnych dziur. Mianowicie, w procesie kwantowego odbicia czarna dziura utworzona przez kolaps materii przechodzi w białą dziurę w tym samym lub innym Wszechświecie.

Niestety, istniejące wyniki zostały uzyskane tylko w ramach bardzo radykalnych uproszczeń LQG (takich jak LQC), zwykle obejmujących tylko skończone klasyczne stopnie swobody. Nie jest a priori wiadome, czy te same zjawiska wystąpiłyby w pełnym LQG lub przynajmniej w jego uproszczeniach nie obejmujących znacznej redukcji stopni swobody. Podczas gdy obecny postęp w zrozumieniu zarówno LQG, jak i jego uproszczeń, a także w stosowaniu metod półklasycznych, czyni badanie dynamiki przynajmniej prostych, aczkolwiek fizycznie istotnych scenariuszy technicznie możliwym, musi ono wykorzystywać zaawansowane symulacje numeryczne jako niezbędny komponent. Na przykład, zarówno w LQG, jak i rLQG, generator ewolucji czasowej jest skomplikowanym operatorem kombinatorycznym działającym na stan kwantowy żyjący na grafie (np. sieci) i nawet w LQC kwantowe równania ruchu prostego jednorodnego anizotropowego wszechświata przybierają postać około  $10^6$  sprzężonych równań różniczkowych.

Z tychże przyczyn wszelkie wykonalne badania interesujących układu fizycznego (takiego jak materia zapadająca się w czarną dziurę) wymagają obliczeń równoległych o wysokiej wydajności.

11. Badanie własności nadprzewodzących stopów wysokiej entropii

Poszukiwania wysokotemperaturowych, odpornych na zewnętrzne pole magnetyczne nadprzewodników, to temat, który leży cały czas w kręgu zainteresowań nauki i przemysłu. W Instytucie Fizyki Doświadczalnej Wydziału Fizyki i Astronomii prowadzone są takie badania doświadczalne, wspierane przez obliczenia teoretyczne. Grupa dra hab. Rafała Idczaka odkryła nowe nadprzewodniki w ramach badań stopów wysokiej entropii. Eksperyment wsparty jest obliczeniami teoretycznymi w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT). Bazuąc na danych doświadczalnych i obliczeniach teoretycznych, w ramach projektu finansowanego z NCN poszukiwana jest metoda selekcji pierwiastków do tworzenia nadprzewodzących stopów wysokiej entropii. Teoretyczne obliczenia, wymagające dużych mocy komputerowych, pozwolą na wyłonienie materiałów wartych zbadania eksperymentalnego.

#### 12. Badanie własności ultracienkich warstw tlenków na różnych podłożach

Ultracienkie warstwy tlenków, najlepiej dwuwymiarowe, na różnych podłożach metalicznych bądź niemetalicznych, są wykorzystywane w różnych dziedzinach nauki i przemysłu. Znajdują zastosowanie w katalizie, spintronice czy projektowaniu nowych materiałów. Obliczenia teoretyczne, choć wymagają dużych mocy komputerowych, w tańszy niż eksperyment sposób, pozwalają na odkrywanie nowych układów o własnościach dedykowanych do konkretnych zastosowań. Współpraca z ośrodkami eksperymentalnymi z całego świata pozwoli następnie na zweryfikowanie w praktyce potencjału takich materiałów. Współpraca pracowników Uniwersytetu z innymi ośrodkami w tym obszarze już zaowocowała ciekawymi wynikami i publikacjami.

#### 13. Symulacje obrazów STM

Skaningowy mikroskop tunelowy (STM) jest obecnie podstawowym narzędziem nauk eksperymentalnych. Okazuje się jednak, że interpretacja otrzymanych przy użyciu STM obrazów nie zawsze jest prosta i bardzo często wymaga pomocy symulacji komputerowych. W Instytucie Fizyki Doświadczalnej prowadzimy obliczenia pozwalające na symulowanie obrazów STM dla różnych układów. Jednym z problemów, który ciągle jest przedmiotem badań i dyskusji naukowych jest „bifaza” obserwowana na powierzchniach tlenków żelaza magnetytu ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) i hematytu ( $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ). Dotychczas prowadzone przez pracowników Uniwersytetu obliczenia, oraz współpraca z ośrodkami zagranicznymi i krajowymi przyniosły znaczący wkład do wyjaśnienia struktury bifazy na powierzchni hematytu. Kontynuacja obliczeń teoretycznych oraz symulacje obrazów STM dla magnetytu, przy współpracy z eksperymentatorami, przyczynią się znacząco do ostatecznego wyjaśnienia tego problemu.

#### 14. Organiczne układy adsorpcyjne na powierzchniach metali

Badania organicznych układów adsorpcyjnych uformowanych na powierzchniach metali w kontekście potencjalnych zastosowań w elektronice przyszłości. Przykładem jest tu dioda i przełącznik molekularny, które należą do podstawowych elementów elektronicznych a poznanie i głębsze zrozumienie procesów fizycznych zachodzących na poziomie atomowym — w tych funkcjonalnych układach molekularnych — pozwoli nam realnie myśleć o ich potencjalnych zastosowaniach w elektronice molekularnej. Istotny jest tutaj aspekt komplementarności: wyniki doświadczalne (prof. Grażyna Antczak i prof. Karina Morgenstern z Uniwersytetu Ruhry w Bochum) są uzupełniane o wyniki badań teoretycznych do których uzyskania niezbędne są komputery o dużych mocach obliczeniowych. Jednym z przykładów może być projekt przełącznika molekularnego realizowanego w postaci pojedynczej molekuly  $\text{H}_2\text{Pc}$  zaadsorbowanej na powierzchni srebra (100), która zmienia swój stan przewodności w obecności ostrza STM.

#### 15. Teoretyczne badania wpływu efektów temperaturowych na przewodność układów molekularnych

Opracowano metodologię badań, w której uczenie maszynowe (machine learning) wraz z metodą nierównowagowych funkcji Greena (obliczenia właściwości transportowych) zastosowano wraz z metodą multiscale approach, gdzie dokładne, kwantowo-mechaniczne rachunki z pierwszych zasad prowadzono równolegle z obliczeniami, w których stosuje się empiryczne potencjały opisujące oddziaływanie pomiędzy poszczególnymi atomami w układzie (force-field methods). Zastosowane

metoda pozwoliła na przeprowadzenie obliczeń dla układów molekularnych składających się z kilku tysięcy atomów i wyznaczenie właściwości transportowych badanych złączy molekularnych w niezerowej temperaturze. Teoretyczne badania są kontynuowane dla kolejnych układów i wymagają dużych mocy obliczeniowych.

16. Formalizm wielokrotnego rozpraszania (ang. Multiple Scattering) elektronów w adaptacji do symulacji wyników metod badawczych powierzchni: DEPES i DAES

Powszechnie wykorzystywanym zjawiskiem do badania składu oraz struktury powierzchni jest dyfrakcja elektronów zachodząca na atomach podłoża. Zjawisko to leży u podstaw takich metod badawczych jak: dyfrakcja powolnych elektronów (skr. ang. LEED), dyfrakcja fotoelektronów rentgenowskich (skr. ang. XPD), dyfrakcja elektronów Augera (skr. ang. AED) i wielu im podobnych. Jedną z metod jest również kierunkowa elektronowa spektroskopia piku elastycznego (ang. directional elastic peak electron spectroscopy – DEPES) oraz kierunkowa spektroskopia elektronów Augera (ang. directional Auger electron spectroscopy – DAES).

Symulacje wyników uzyskiwanych metodami DEPES oraz DAES opierają się na teoretycznym opisie elastycznego rozpraszania elektronów na potencjale atomu – jest to dobrze znany i szeroko stosowany formalizm, jednak tutaj zastosowany do sieci krystalicznych badanych podłoży. Wymaga to wprowadzenia formalizmu wielokrotnego rozpraszania (MS). Ze względu na złożoność obliczeń (np. rekurencja, ilość centr rozpraszających, liczba przesunięć fazowych itd.), symulacje wyników można wykonywać jedynie na wieloprocessorowych oraz wielordzeniowych maszynach obliczeniowych, czyli tzw. klastrach. Takie symulacje obrazów DEPES oraz DAES były już wielokrotnie wykorzystywane w trakcie analizy zachodzących procesów na badanych powierzchniach.

#### **Planowane wyniki prac lub zadań oraz ich znaczenie dla rozwoju nauki, innowacyjności i gospodarki:**

W ramach użytkowania klastra obliczeniowego planujemy:

1. Przeprowadzić ulepszoną analizę danych z LHC dotyczących produkcji hadronów.
2. Zbadać nowe równania stanu przewidywanego przez w pełni dynamiczny model kwarku chiralnego.
3. Poprawić w generatorze NuWro moduły opisujące wzbudzenia dwie cząstki - dwie dziury oraz porównać przewidywania generatora z pomiarami eksperymentalnymi.
4. Skonstruować model bazujący na sieci neuronowej, który będzie odtwarzał przekroje czynne dla rozpraszania neutrin i elektronów na jądrach atomowych. Uzyskanie modelu będzie wymagało przeprowadzenie długich i wymagających dużych zasobów obliczeniowych symulacji.
5. Skonstruować Bayesowski solver równań różniczkowych opisujących dynamikę płynów.
6. Uzyskać głęboką sieć neuronową, która będzie odtwarzała rozkłady prędkości w transporcie płynów w materiałach porowatych.
7. Rozwój technik pomiarowych w zakresie detekcji korelacji kwantowych
8. Przeprowadzić optymalizację kwantowych protokołów komunikacyjnych w warunkach rzeczywistych
9. Przeprowadzić parametryczne badanie przepływu dla wysokich liczb Reynoldsa (zwanymi również przepływami turbulentnymi) w mediach porowatych. Badania te przyczynią się do zrozumienia dynamiki płynów w różnych kontekstach geologicznych i środowiskowych.
10. Zrozumienie turbulentnych przepływów w mediach porowatych ma znaczące implikacje dla różnych dziedzin, w tym inżynierii środowiska, geotechniki i hydrologii. Międzynarodowa współpraca w tym obszarze badawczym może prowadzić do ulepszonych technik modelowania, lepszych prognoz i

innowacyjnych rozwiązań w celu sprostania wyzwaniom środowiskowym, takim jak zanieczyszczenie wód gruntowych, erozja gleby i transport zanieczyszczeń, prognozowanie zmian pogody.

11. Wyniki uzyskane poprzez bezpośrednie symulacje numeryczne (DNS) zapewnią kompleksowe zrozumienie wpływu różnych parametrów na wzorce przepływu, turbulencje intensywność i rozpraszanie energii. Wyniki te przyczynią się do rozwoju wiedzy naukowej w dziedzinie mechaniki płynów.

12. Wyniki badań doprowadzą do rozwoju i udoskonalenia technik modelowania przepływu turbulentnego w ośrodkach porowatych. Spostrzeżenia uzyskane z badań parametrycznych mogą być wykorzystane do ulepszenia istniejących modeli obliczeniowych i metod numerycznych, umożliwiając dokładniejsze przewidywanie zachowania przepływu w rzeczywistych układach.

13. Dostęp do możliwości obliczeniowych oferowanych przez klaster pozwoli na zbadanie dynamiki wczesnego kwantowego Wszechświata i zrozumienie procesu powstawania czarnych dziur, ich parowania i ostatecznego losu w sposób znacznie bardziej solidny niż pierwotne badania przeprowadzone z wykorzystaniem modeli LQC.

Chociaż nie należy oczekiwać żadnych komercyjnych zastosowań tych wyników, znacznie zwiększą one nasze zrozumienie rzeczywistości fizycznej na najbardziej fundamentalnym poziomie. Pojawienie się paradygmatu big bounce ponad dekadę temu nie tylko przyciągnęło uwagę społeczności kosmologicznej, ale wzbudziło zainteresowanie całej społeczności naukowej (włączając w to filozofów), a nawet przyciągnęło uwagę prasy popularnej. Weryfikacja tych wyników, oraz możliwość uzyskania nowych, nieoczekiwanych rezultatów mają szansę na wygenerowanie podobnego wpływu.

14. Uzyskanie nowych nadprzewodników na bazie stopów wysokiej entropii i opracowanie metody wyłaniania pierwiastków do tworzenia takich nadprzewodzących materiałów.

15. Znalezienie układów dwuwymiarowych na różnych podłożach dedykowanych do konkretnych zastosowań (kataliza, spintronika, nowe materiały).

16. Wyjaśnienie problemu bifazy na powierzchniach tlenków żelaza oraz interpretacja obrazów STM obserwowanych doświadczalnie.

#### **Informacja o osiągnięciach naukowych wnioskodawcy, wykazanych z 4 lat poprzedzających złożenie wniosku (publikacje, patenty lub inne) – powiązanych z wnioskowaną inwestycją**

Cleymans, Jean, et al. "Multiplicity dependence of (multi) strange baryons in the canonical ensemble with phase shift corrections." *Physical Review C* 103.1 (2021): 014904.

Andronic, Anton, et al. "The thermal proton yield anomaly in Pb-Pb collisions at the LHC and its resolution." *Physics Letters B* 792 (2019): 304-309.

Lo, Pok Man, et al. "Driving chiral phase transition with ring diagram." *The European Physical Journal A* 58.9 (2022): 172.

Krzysztof M. Graczyk, M. Matyka Predicting Porosity, Permeability, and Tortuosity of Porous Media from Images by Deep Learning, *Sci Rep* 10, 21488 (2020)

Krzysztof M. Graczyk, Beata E. Kowal, Spin asymmetry in single pion production induced by weak interactions of neutrinos with polarized nucleons, *Physical Review D* 99, 053002 (2019)

J.T. Sobczyk, Julia Tena Vidal et al. , Comparison of validation methods of simulations for final state interactions in hadron production experiments Steven Dytman , Yoshinari Hayato, Roland Raboanary, *Physical Review D* 104 (2021) 5, 053006 (35 cytowan)

Kajetan Niewczas, Jan T. Sobczyk, Nuclear Transparency in Monte Carlo Neutrino Event Generators, *Physical Review C* 100 (2019) 1, 015505.

Matyka, M., Dzikowski, M. Memory-efficient Lattice Boltzmann Method for low Reynolds number flows *Computer Physics Communications* 267, 108044 (2021)

Barasiński, Artur, Jan Peřina Jr, and Antonín Černoř. "Quantification of quantum correlations in two-beam Gaussian states using photon-number measurements." *Physical Review Letters* 130.4 (2023): 043603.

Barasiński, Artur, et al. "Genuine tripartite nonlocality for random measurements in Greenberger-Horne-Zeilinger-class states and its experimental test." *Physical Review A* 101.5 (2020): 052109.

Assanioussi, Mehdi, Andrea Dapor, Klaus Liegener, and Tomasz Pawłowski. "Emergent de Sitter epoch of the loop quantum cosmos: A detailed analysis." *Physical Review D* 100, no. 8 (2019): 084003.

Dapor, Andrea, Klaus Liegener, and Tomasz Pawłowski. "Challenges in recovering a consistent cosmology from the effective dynamics of loop quantum gravity." *Physical Review D* 100.10 (2019): 106016.

Brizuela, David, and Tomasz Pawłowski. "Quantum fluctuations and semiclassicality in an inflaton-driven evolution." *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics* 2022, no. 10 (2022): 080.

Parvizi, A., Pawłowski, T., Tavakoli, Y., & Lewandowski, J. (2022). Rainbow black hole from quantum gravitational collapse. *Physical Review D*, 105(8), 086002.

Tomasz Ossowski, Ying Wang, Giovanni Carraro, Adam Kiejna, Mikołaj Lewandowski, Structure of mono- and bilayer FeO on Ru(0001): STM and DFT study, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 546 (2022) 168832,1-9.

Natalia Michalak, Tomasz Ossowski, Zygmunt Miłosz, Mauricio J. Prieto, Ying Wang, Mirosław Werwiński, Viřnja Babaćić, Francesca Genuzio, Luca Vattuone, Adam Kiejna, Thomas Schmidt, Mikołaj Lewandowski, Ostwald Ripening in an Oxide-on-Metal System, *Advanced Materials Interfaces* 9 (2022) 2200222,1-7

Piotr Sobota, Rafał Topolnicki, Tomasz Ossowski, T. Pikula, Adam Pikul, Rafał Idczak, Superconductivity in the high-entropy alloy (NbTa)<sub>0.67</sub> (MoHfW)<sub>0.33</sub>, *PHYSICAL REVIEW B* 106 (2022) 184512,1-10

Tomasz Ossowski, Tomasz Pabisiak, Adam Kiejna, Krisztián Palotás, Ernst Bauer, Simulation of STM Images of Hematite  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) Surfaces: Dependence on Distance and Bias, *Journal of Physical Chemistry C* 125 (2021) 26711–26717

Wojciech Kamiński, Grażyna Antczak, Karina Morgenstern, Bistable H<sub>2</sub>Pc Molecular Conductance Switch on Ag(100), *Journal of Physical Chemistry C* 126 (2022) 16767–16776.

Rafał Topolnicki, Robert Kucharczyk, Wojciech Kamiński, Combining Multiscale MD Simulations and Machine Learning Methods to Study Electronic Transport in Molecular Junctions at Finite Temperatures, *Journal of Physical Chemistry C* 125(2021) 19961–19968

### **Możliwość wykorzystania wnioskowanej inwestycji przez inne podmioty, w ramach współpracy wnioskodawcy z tymi podmiotami**

W ramach współpracy z różnymi ośrodkami w kraju i na świecie, nasi pracownicy będą prowadzić obliczenia w zakresie wspólnych badań i projektów, co będzie stanowić znaczący zysk zarówno dla UW i ośrodków, z którymi współpracujemy.