

ISSN: 1991-346X (Print)
ISSN: 2518-1726 (Online)

**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№3
2025**

ISSN 2518-1483 (Online),
ISSN 2224-5227 (Print)

2025 • 3



ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

Editor-in-Chief:

ZHURINOV Murat Zhurinovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Acting President of RPA NAS RK, General Director of JSC "Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry named after D.V. Sokolsky" (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>

Editorial Board:

KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>

ADEKENOV Sergazy Mynzhasarovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Director of the International Science and Production Holding "Phytochemistry" (Karaganda, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>

RAMAZANOV Tlekkabul Sabitovich, (Deputy Editor-in-Chief), Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>

ABIEV Rufat, Doctor of Technical Sciences (Biochemistry), Professor, Head of the Department of Optimization of Chemical and Biotechnological Equipment, St. Petersburg State Technological Institute (St. Petersburg, Russia) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>

OLIVIERO Rossi Cesare, PhD (Chemistry), Professor at the University of Calabria (Calabria, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>

TIGINYANU Ion Mihailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician, President of the Academy of Sciences of Moldova, Technical University of Moldova (Chisinau, Moldova), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>

SANG SU Kwak, PhD (Biochemistry, Agricultural Chemistry), Professor, Chief Scientist, Research Center for Plant Systems Engineering, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology (KRIBB), (Daecheon, Korea), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>

BERSIMBAYEV Rakhmetkazi Iskenderovich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Academician of NAS RK, L.N. Gumilyov Eurasian National University (Astana, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>

CALANDRA Pietro, PhD (Physics), Professor, Institute for the Study of Nanostructured Materials (Rome, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>

BOSHKAEV Kuantai Aygazyevich, PhD, Associate Professor, Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>

BURKITBAEV Mukhambetkali, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>

QUEVEDO Hernando, Professor, National Autonomous University of Mexico (UNAM), Institute of Nuclear Sciences (Mexico City, Mexico), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>

ZHUSUPOV Marat Abzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>

KOVALEV Alexander Mikhailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician of NAS of Ukraine, Institute of Applied Mathematics and Mechanics (Donetsk, Ukraine), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>

TAKIBAEV Nurgali Zhabagaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>

KHARIN Stanislav Nikolaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Kazakh-British Technical University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>

DAVLETOV Askar Erbulanovich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Branch of NRNU MEPhI Kazakh National University named after Al-Farabi (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602642543>

ABISHEV Medeu Erzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>

ABILMAGZHANOV Arlan Zainutallaevich, PhD in Chemistry, First Deputy Director General of JSC "Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry named after D.V. Sokolsky", (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES.**ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)**

Owner: «Central Asian Academic Research Center» LLP (Almaty).

The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of Information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan № **KZ93VPY00121157** issued **05.06.2025**Thematic scope: *physics and chemistry*.

Periodicity: 4 times a year.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

Бас редактор:

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрыңұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, ҚР ҰҒА РҚБ президенті м.а., АҚ «Д.В. Сокольский атындағы Отын, катализ және электрохимия институтының» бас директоры (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>

Редакция ұжымы:

ҚАЛИМОЛДАЕВ Мақсат Нұрәліұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>

ӘДЕКЕНОВ Серғазы Мыңжасарұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, «Фитохимия» халықаралық ғылыми-өндірістік холдингінің директоры (Қарағанды, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>

РАМАЗАНОВ Тілекқабұл Сәбитұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің ғылыми-инновациялық қызмет жөніндегі проректоры, (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>

ӘБИЕВ Руфат, техника ғылымдарының докторы (биохимия), профессор, Санкт-Петербург мемлекеттік технологиялық институты «Химиялық және биотехнологиялық аппаратураны оңтайландыру» кафедрасының меңгерушісі, (Санкт-Петербург, Ресей) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>

ОЛИВЬЕРО Росси Сезаре, PhD (химия), Калабрия университетінің профессоры (Калабрия, Италия) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова Ғылым Академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>

САНГ-СУ Квак, PhD (биохимия, агрохимия), профессор, Корея Биоғылым және биотехнология ғылыми-зерттеу институты (KRIBB), өсімдіктердің инженерлік жүйелері ғылыми-зерттеу орталығының бас ғылыми қызметкері, (Дэчон, Корея) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>

БЕРСІМБАЕВ Рахметқажы Ескендірұлы, биология ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. (Астана, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>

КАЛАНДРА Пьетро, PhD (физика), нанокүрылымды материалдарды зерттеу институтының профессоры (Рим, Италия) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>

БОШКАЕВ Құнтай Ағвазыұлы, Ph.D. Теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>

Бүркітбаев Мұхамбетқали, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>

QUEVEDO Hernando, профессор, Мексика ұлттық автономиялық университеті (UNAM), Ядролық ғылымдар институты (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>

ЖҮСІПОВ Марат Абжанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, Украина ҰҒА академигі, Қолданбалы математика және механика институты (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>

ТАКИБАЕВ Нұрғали Жабағаұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>

ХАРИН Станислав Николаевич, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>

ДАВЛЕТОВ Асқар Ербуланович, физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, ҰЯЗУ МИФИ әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602642543>

ӘБІШЕВ Медеу Ержанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>

ӘБІЛМАҒЖАНОВ Арлан Зайнуталлаұлы, химия ғылымдарының кандидаты, Д.В. Сокольский атындағы "Отын, катализ және электрохимия институты" АҚ Бас директорының бірінші орынбасары, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

Меншіктеуші: «Орталық Азия академиялық ғылыми орталығы» ЖШС (Алматы қ.).

Ақпарат агенттігінің мерзімді баспасөз басылымын, ақпарат агенттігін және желілік басылымды қайта есепке қою туралы ҚР Мәдениет және Ақпарат министрлігі «Ақпарат комитеті» Республикалық мемлекеттік мекемесі **05.06.2025 ж.** берген № **KZ93VPY00121157** Күзлік.

Тақырыптық бағыты: *физика, химия.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

Главный редактор:

ЖУРИНОВ Мурат Журинович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, и.о. президента РОО НАН РК, Генеральный директор АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского» (Алматы, Казахстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>

Редакционная коллегия:

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нурадилович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>

АДЕКЕНОВ Сергазы Мынжасарович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, директор Международного научно-производственного холдинга «Фитохимия» (Караганда, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>

РАМАЗАНОВ Тлеккабул Сабитович, (заместитель главного редактора), доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>

АБИЕВ Руфат, доктор технических наук (биохимия), профессор, заведующий кафедрой «Оптимизация химической и биотехнологической аппаратуры», Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Санкт-Петербург, Россия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>

ОЛИВЬЕРО Росси Чезаре, доктор философии (PhD, химия), профессор Университета Калабрии (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, доктор физико-математических наук, академик, президент Академии наук Молдовы, Технический университет Молдовы (Кишинев, Молдова), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>

САИГ-СУ Квак, доктор философии (PhD, биохимия, агрохимия), профессор, главный научный сотрудник, Научно-исследовательский центр инженерных систем растений, Корейский научно-исследовательский институт бионауки и биотехнологии (KRIBB), (Дэчон, Корея), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>

БЕРСИМБАЕВ Рахметкажи Искендерович, доктор биологических наук, профессор, академик НАН РК, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева (Астана, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>

КАЛАНДРА Пьетро, доктор философии (PhD, физика), профессор Института по изучению наноструктурированных материалов (Рим, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>

БОШКАЕВ Кунтайт Авгазыевич, PhD, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>

БҮРКИТБАЕВ Мухамбеткали, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>

QUEVEDO Hernando, профессор, Национальный автономный университет Мексики (UNAM), Институт ядерных наук (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>

ЖУСУПОВ Марат Абжанович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, академик НАН Украины, Институт прикладной математики и механики (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>

ТАКИБАЕВ Нургали Жаббагаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>

ДАВЛЕТОВ Аскар Ербуланович, кандидат физико-математических наук, доцент, Филиал НИЯУ МИФИ Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602642543>

АБИШЕВ Медеу Ержанович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>

АБИЛЬМАГЖАНОВ Арлан Зайнуталлаевич, кандидат химических наук, первый заместитель генерального директора АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)**

Собственник: ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр» (г. Алматы).

Свидетельство № KZ93VPY00121157 о повторной регистрации периодического печатного издания информационного агентства, информационного агентства и сетевого издания, выданное Республиканским государственным учреждением «Комитет информации» Министерства культуры и информации Республики Казахстан **05.06.2025**Тематическая направленность: *физика, химия*.

Периодичность: 4 раза в год.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

© ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр», 2025

CONTENTS

PHYSICS

M.B. Albatyrova

Energy evolution equation in a nonlinear spin system: derivation and numerical modeling.....11

E.A. Dmitriyeva, A.E. Kemelbekova, A.K. Shongalova, O.A. Shilova

Effect of the precursor concentration on the morphology and photosensitivity of the resulting ZnO thin films.....21

A. Istlyaup, L. Myasnikova, A. Lushchik

Computer simulation of the electrical properties of a carbon sheet with alkali metal iodide crystals.....33

A. Kenesbayeva, Ye.I. Kuldeev, E.O. Shalenov, T.B. Nurpeissova

Determination of the gravitational constant.....49

Sh.T. Nurmakhmetova, N.L. Vaidman, S.A. Khokhlov, A.T. Agishev, A.A. Khokhlov

The emission-line dusty object IRAS 07080+0605: evidence for binarity.....60

E.Otunchi, A.A. Migunova, A.Umirzakov, N.Tokmoldin

Effect of the composition of the film-forming system on the properties of SnO₂ films obtained by spray pyrolysis.....71

U.A. Ualikhanova, A.N. Abdipatta, O.V. Razina, A.M. Syzdykova, G.S. Altayeva

Bulk viscosity in f(T) gravity and its impact on cosmological evolution.....83

A.Zh. Umirbayeva, L. Aktay, L.N. Kondratyeva, I.M. Izmailova, A. Shomshekova

Methodology for the reduction of archival slit spectra of planetary nebulae.....99

N. Eghtesadi, S.S. Uzakbaeva, Z.K. Aimaganbetova, N.N. Zhanturina, A.Z. Bekeshev

Prediction of the kinetic properties of low-density polyethylene.....115

D. Yurin, D. Kuvatova, A. Glushenko, Ch. Omarov, M. Makukov

Analysis of the limits of direct n-body simulation using Nvidia RTX4090 GPU cards.....131

CHEMISTRY

| | |
|--|-----|
| A.S. Beisenova, A.A. Zhanybekova, M.M. Duysebaeva, G.E. Berganaeva Study of the chemical composition of <i>Centaurea diffusa</i> Lam. growing in the territory of Almaty region..... | 146 |
| N.N. Berikbol, Zh.S. Kassymova, L.K. Orazzhanova, A.N. Klivenko, N.N. Nurgaliyev Synthesis of interpolyelectrolyte complexes from fluorescently labeled biopolymers..... | 161 |
| O.A.Yessimova, S.Sh. Kumargaliyeva, B.K. Musabekov, A.K. Konysbek Colloidal - chemical properties of alhagi and tansy (<i>tanacetum</i>) hydrolates..... | 182 |
| R.N. Zhanaliyeva, B. Imangaliyeva, B. Torsykbaeva, R. Kozykeyeva Catalytic hydrogenation of carbonyl-containing compounds: mechanism, catalysts and application..... | 193 |
| M.A. Zhumash, K. Tilegen, Y.A. Boleubayev, S.S. Itkulova Dry reforming of methane over the high active Co-Fe-Ir-containing alumina supported catalyst..... | 207 |
| M. Ibrayeva, N. Sagdollina, Zh. Mukazhanova, Sh. Sanyazova, M.Ozturk Optimization of flavonoid extraction conditions from a plant of the genus <i>Symphotrichum novi-belgii</i> | 218 |
| M.K. Kurmanaliev, Zh.E. Shaikhova, S.O. Abilkasova Supramolecular polymeric receptors for binding alkali metal ions..... | 228 |
| Y.A. Mussatay, M.I. Tulepov Carbon filters from rice husk for air purification in confined spaces..... | 238 |
| A.Zh. Mutushev, A.B. Seisenova, O.S. Kapizov, A.M. Nuraly, D.K. Mukhanov Integrated process for the synthesis of carbon–silicon nanocomposites from biowaste and metallurgical sludge..... | 258 |
| A.S. Sass, I.I. Torlopov, K.S. Rakhmetova, D.A. Zhumadullaev, M. Zhurinov Influence of metal surface mechanical preparation on the properties of phosphate coatings..... | 274 |

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

М.Б. Альбатырова

Сызықтық емес спиндік жүйедегі энергия эволюциясының теңдеуі:
шығарылуы және сандық модельдеу.....11

Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова, А.Қ. Шонғалова, О.А. Шилова

Прекурсор концентрациясының алынған жұқа ZnO жабындарының
құрылымы мен фотосезімталдығына әсері.....21

**Н. Эхтесади, С.С. Узакбаева, З.К. Аймағанбетова, Н.Н. Жантурина,
А.З. Бекешев**

Төмен тығыздықтағы полиэтиленнің кинетикалық қасиеттеріне
болжау жасау.....33

А. Истляуп, Л. Мясникова, А. Лущик

Сілтілі металл иодидтерінің кристалдарымен көміртек қабатының
электрлік қасиеттерін компьютерлік модельдеу.....49

А. Кенесбаева, Е. Кульдеев, Е. Шаленов, Т. Нурпеисова

Гравитациялық тұрақтыны анықтау.....60

Ш.Т. Нурмахаметова, Н.Л. Вайдман, С.А. Хохлов, А.Т. Агишев, А.А. Хохлов

IRAS 07080+0605 эмиссиялық объекті: екіжұлдыздық жүйенің дәлелі.....71

Е. Отунчи, А.А. Мигунова, А.Г. Умирзаков, Н. Токмолдин

Жабын түзуші жүйе құрамының спрей-пиролиз әдісімен алынған
SnO₂ жабындарының қасиетіне әсері.....83

У.А. Уалиханова, А.Н. Әбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова, Г.С. Алтаева

$f(T)$ гравитациясындағы көлемдік тұтқырлық және оның
космологиялық эволюцияға әсері.....99

**А.Ж. Умирбаева, Л. Актай, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова,
С.А. Шомшекова**

Планетарлық тұмандықтардың архивтік саңылаулы спектрлерін
өңдеу әдістемесі.....115

Д. Юрин, Д. Куватова, А. Глущенко, Ч. Омаров, М. Макуков

N-бөлшекті тікелей үлгілеудің шектерін Nvidia RTX 4090
GPU-карталарын пайдаланып талдау.....131

ХИМИЯ

- А.С. Бейсенова, А.А. Жаныбекова, Г.Е. Берганаева, М.А. Дюсебаева**
Алматы облысының аумағында өсетін шашыңқы гүлкекіре *Centaurea diffusa lam.* өсімдігінің химиялық құрамын зерттеу.....146
- Н.Н. Берікбол, Ж.С. Касымова, Л.К. Оразжанова, А.Н. Кливенко, Н.Н. Нургалиев**
Флуоресцентті таңбаланған биополимерлерден интерполиэлектrolиттік комплексті синтездеу.....161
- О.А. Есимова, С.Ш. Құмарғалиева, К.Б. Мусабеков, А.Қ. Қонысбек**
Жантақ және түймешетен гидрولاتтарының коллоидтық-химиялық қасиеттері.....182
- Р.Н. Жаналиева, Б. Иманғалиева, Б.Б. Торсыкбаева, Р. Козыкеева, Р.Э. Ходжаназаров**
Құрамында карбонил бар қосылыстардың каталитикалық гидрогенизациясы: механизмі, катализаторлары және қолданылуы.....193
- М.А. Жұмаш, К.Т. Тілеген, Е.А. Болеубаев, Ш.С. Иткулова**
Алюминий тотығына қондырылған жоғары белсенді Co-Fe-Ir құрайтын катализатордағы метанның құрғақ риформингі.....207
- М. Ибраева, Н. Сағдоллина, Ж. Мукажанова, Ш. Санъязова, М. Ozturk**
Symphyotrichum novi-belgii тұқымдас өсімдіктен флавоноидтарды алу жағдайларын оңтайландыру.....218
- М.Қ. Құрманалиев, Ж.Е. Шаихова, С.О. Әбілқасова**
Сілтілік металл иондарын байланыстыруға арналған супрамолекулалық полимерлік рецепторлар.....228
- Е.А. Мұсатай, М.И. Тулепов**
Шағын кеңістіктегі ауаны тазартуға арналған күріш қауызы негізіндегі көміртек құрамды сүзгілер.....238
- А.Ж. Мутушев, А.Б. Сейсенова, Ө.С. Капизов, Ә.М. Нұралы, Д.К. Муханов**
Биоқалдықтар мен металлургиялық шламнан көміртек–кремний нанокөміртерін синтездеудің интеграцияланған әдісі.....258
- А.С. Сасс, И.И. Торлопов, К.С. Рахметова, Д.А. Жумадуллаев, М. Журинов**
Металдар бетін механикалық дайындаудың фосфатты жабындар қасиеттеріне әсері.....274

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

М.Б. Альбатырова

Уравнение эволюции энергии в нелинейной спиновой системе:
вывод и численное моделирование.....11

Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова, А.Қ. Шонғалова, О.А. Шилова

Влияние концентрации прекурсора на морфологию и фоточувствительность
получаемых тонких пленок ZnO.....21

А. Истляуп, Л. Мясникова, А. Лущик

Компьютерное моделирование электрических свойств углеродного листа
с кристаллами йодидов щелочных металлов.....33

А. Кенесбаева, Е. Кульдеев, Е. Шаленов, Т. Нурпеисова

Определение гравитационной постоянной.....49

Ш.Т. Нурмахаметова, Н.Л. Вайдман, С.А. Хохлов, А.Т. Агишев, А.А. Хохлов

Эмиссионный пылевой объект IRAS 07080+0605: доказательство двойной
природы.....60

Е. Отунчи, А.А. Мигунова, А.Г. Умирзаков, Н. Токмолдин

Влияние состава пленкообразующей системы на свойства пленок
SnO₂, полученных методом спрей-пиролиза.....71

У.А. Уалиханова, А.Н. Эбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова, Г.С. Алтаева

Объемная вязкость в $f(T)$ гравитации и ее влияние
на космологическую эволюцию.....83

**А.Ж. Умирбаева, Л. Актай, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова,
С.А. Шомшекова**

Методика обработки архивных щелевых спектров планетарных туманностей...99

**Н. Эхтесади, С.С. Узакбаева, З.К. Аймаганбетова, Н.Н. Жантурина,
А.З. Бекешев**

Прогнозирование кинетических свойств полиэтилена низкой плотности.....115

Д. Юрин, Д. Куватова, А. Глущенко, Ч. Омаров, М. Макуков

Анализ пределов прямого моделирования n-тел с использованием
GPU-карт Nvidia RTX4090.....131

ХИМИЯ

| | |
|--|-----|
| А.С. Бейсенова, А.А. Жаныбекова, М.А. Дюсебаева, Г.Е. Берганаева Исследование химического состава василек раскидистый <i>Centaurea diffusa</i> Lam., растущий на территории Алматинской области..... | 146 |
| Н.Н. Берікбол, Ж.С. Касымова, Л.К. Оразжанова, А.Н. Кливенко, Н.Н. Нургалиев Синтез интерполиэлектrolитных комплексов на основе флуоресцентно-меченых биополимеров..... | 161 |
| О.А. Есимова, С.Ш. Кумаргалиева, К.Б. Мусабеков, А.Қ. Конысбек Коллоидно-химические свойства гидратов верблюжьей колючки и пижмы...182 | 182 |
| Р.Н. Жаналиева, Б. Имангалиева, Б.Б. Торсыкбаева, Р. Козыкеева, Р.Э. Ходжаназаров Каталитическое гидрирование карбонилсодержащих соединений: механизм, катализаторы и применение..... | 193 |
| М.А. Жұмаш, К.Т. Тілеген, Е.А. Болеубаев, Ш.С. Иткулова Сухой риформинг метана на высокоактивном Co-Fe-Ir содержащем нанесенном на оксид алюминия катализаторе..... | 207 |
| М. Ибраева, Н. Сағдоллина, Ж. Мукажанова, Ш. Санъязова, М. Ozturk Оптимизация условий экстракции флавоноидов из растения рода <i>Symphotrichum novi-belgii</i> | 218 |
| М.К. Курманалиев, Ж.Е. Шаихова, С.О. Абилкасова Супрамолекулярные полимерные рецепторы для связывания ионов щелочных металлов..... | 228 |
| Е.А. Мұсатай, М.И. Тулепов Углеродные фильтры из рисовой шелухи для очистки воздуха в стесненных помещениях..... | 238 |
| А.Ж. Мутушев, А.Б. Сейсенова, О.С. Капизов, А.М. Нуралы, Д.К. Муханов Интегрированная технология получения углеродно-кремниевых нанокомпозитов из биоотходов и металлургических шламов..... | 258 |
| А.С. Сасс, И.И. Торлопов, К.С. Рахметова, Д.А. Жумадуллаев, М. Журинов Влияние механической подготовки поверхности металла на свойства фосфатных покрытий..... | 274 |

© D. Yurin¹, D. Kuvatova^{1,2}, A. Glushenko^{1,2}, Ch. Omarov¹, M. Makukov¹, 2025.

¹Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, Physics and Technology Department,
Almaty, Kazakhstan.

E-mail: yurin@fai.kz

ANALYSIS OF THE LIMITS OF DIRECT N-BODY SIMULATION USING NVIDIA RTX4090 GPU CARDS

D. Yurin — PhD in Astronomy and Astrophysics, Heidelberg University, Heidelberg; Head of theoretical astrophysics department, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: yurin@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5604-9757>;

D. Kuvatova — correspondence author, 1st year PhD student, Department of Electronics and Astrophysics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty; Junior researcher, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kuvatova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5937-4985>;

A. Glushenko — 2nd year Master's student, Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty; Engineer, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: gluchshenko@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0738-7725>;

Ch. Omarov — Professor, PhD in Physics and Mathematics; Director, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: chingis.omarov@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

M. Makukov — Master's degree from the Department of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow; Acting head of the Laboratory of Cosmology, Stellar Dynamics and Computational Astrophysics, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: makukov@fai.kz, <http://orcid.org/0000-0003-3643-9368>.

Abstract. Direct N-body simulation is an important tool for studying the evolution of dense stellar systems such as globular clusters and central star clusters at galactic centers. These are collisional systems in which the stellar orbits undergo two-body relaxation, occurring over a characteristic time scaled as $N / \log N$ depending on the number of particles. To more accurately account for key dynamical processes such as core collapse, mass segregation, pairwise interactions, evaporation, and tidal blurring, it is essential to model such systems over at least one relaxation time. Direct N-body modeling is the most accurate method for simulating the effects of pairwise relaxation. However, it scales as $O(N^2)$ per time step, and since the evolution due to pair relaxation requires integration over a time interval proportional to $N / \log N$, the total computational cost of such a simulation scales approximately as $O(N^3 / \log N)$, which makes the

simulation of large collisional systems extremely time-consuming and computationally expensive. In this paper, we present the results of testing and analyzing the performance of a new GPU server of the Fesenkov Astrophysical Institute's computing cluster based on 10 NVIDIA RTX 4090 cards, and also evaluate its scalability. An upper limit on the optimal number of cards for simulating N-body motion is determined depending on the number of particles. The reasons for the existence of such a limit are analyzed and ways to overcome it are proposed.

Keywords: N-body simulation, parallel computing, direct integration, collisional systems, star clusters

© Д. Юрин¹, Д. Куватова^{1,2}, А. Глущенко^{1,2}, Ч. Омаров¹, М. Макуков¹, 2025.

¹В.Г. Фесенков атындағы астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан;

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: yurin@fai.kz

Н-БӨЛШЕКТІ ТІКЕЛЕЙ ҮЛГІЛЕУДІҢ ШЕКТЕРІН NVIDIA RTX 4090 GPU-КАРТАЛАРЫН ПАЙДАЛАНЫП ТАЛДАУ

Д. Юрин — физика және астрономия саласындағы PhD, Гейдельберг университеті, Гейдельберг; Теориялық Астрофизика бөлімінің меңгерушісі, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: yurin@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5604-9757>;

Д. Куватова — корреспондент автор, электроника және астрофизика кафедрасының 1-курс докторанты, Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ; Кіші ғылыми қызметкер, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kuvatova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5937-4985>;

А. Глущенко — теориялық және ядролық физика кафедрасының 2 курс магистранты, Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы; Инженер, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: gluchshenko@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0738-7725>;

Ч. Омаров — профессор, физика және математика саласындағы PhD; Директор, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: chingis.omarov@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

М. Макуков — М.В. Ломоносов атындағы Мәскеу мемлекеттік университетінің физика факультетінің магистр дәрежесі, Мәскеу; Космология, жұлдызды динамика және есептеу астрофизикасы зертханасының меңгерушісінің м. а., В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: makukov@fai.kz, <http://orcid.org/0000-0003-3643-9368>.

Аннотация. N-бөлшекті тікелей үлгілеу тығыз жұлдыздық жүйелердің, мысалы, шар тәрізді шоғырлар мен галактикалардың орталық жұлдыздық шоғырларының эволюциясын зерттеудің маңызды құралы болып табылады. Бұл – екі бөлшектің релаксациясына ұшырайтын жұлдыздық орбиталармен сипатталатын соқтығысатын жүйелер. Бұл процесс бөлшектер санына байланысты $N / \log N$ ретінде масштабталады. Ядроның коллапсы, масса сегрегациясы, қосарлы өзара әрекеттесулер, булану және толқындық бұлыңғырлану сияқты негізгі динамикалық процестерді дәлірек есепке алу үшін мұндай жүйелерді

кемінде бір релаксация уақыты бойы үлгілеу өте маңызды. N -бөлшекті тікелей үлгілеу – қосарлы релаксацияның әсерлерін үлгілеудің ең дәл әдісі. Алайда, бұл әдіс бір уақыттық кадамға $O(N^2)$ ретінде масштабталады, ал қосарлы релаксация арқылы басқарылатын эволюция уақыт аралығын $N / \log N$ пропорциясында интеграциялауды талап етеді. Сондықтан мұндай үлгілеудің жалпы есептеу шығыны шамамен $O(N^3 / \log N)$ болып масштабталады, бұл үлкен соқтығысатын жүйелерді үлгілеуді есептеу уақыты мен ресурстарын өте көп қажет ететін процесс етеді. Бұл жұмыста біз В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институттың есептеу кластеріндегі 10 NVIDIA RTX 4090 картасына негізделген жаңа GPU-серверінің өнімділігін тестілеу және талдау нәтижелерін ұсынамыз, сондай-ақ оның масштабтау мүмкіндіктерін бағалаймыз. N -бөлшектің қозғалысын үлгілеу үшін бөлшектер санына байланысты карталардың оңтайлы санының жоғарғы шегі анықталды. Мұндай шектің болу себептері талданып, оны еңсеру жолдары ұсынылды.

Түйін сөздер: N -бөлшекті үлгілеу, параллель есептеулер, тікелей интеграциялау, соқтығысатын жүйелер, жұлдыздық шоғырлар

© Д. Юрин¹, Д. Куватова^{1,2}, А. Глущенко^{1,2}, Ч. Омаров¹, М. Макуков¹, 2025.

¹Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан.

E-mail: yurin@fai.kz

АНАЛИЗ ПРЕДЕЛОВ ПРЯМОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ N -ТЕЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ GPU-КАРТ NVIDIA RTX4090

Д. Юрин — PhD в области астрономии и астрофизики, Гейдельбергский университет, Гейдельберг; Заведующий лабораторией теоретической астрофизики, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: yurin@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5604-9757>;

Д. Куватова — автор для корреспонденций, докторант 1 курса кафедры электроники и астрофизики, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы; МНС, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: kuvatova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5937-4985>;

А. Глущенко — магистрант 2 курса кафедры теоретической и ядерной физики, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы; Инженер, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: gluchshenko@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0738-7725>;

Ч. Омаров — Профессор, PhD в области физики и математики, Директор, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: chingis.omarov@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

М. Макуков — степень магистра физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва; И.о. заведующего лабораторией космологии, звездной динамики и вычислительной астрофизики, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: makukov@fai.kz, <http://orcid.org/0000-0003-3643-9368>.

Аннотация. Прямое моделирование N -тел является важным инструментом для изучения эволюции плотных звездных систем, таких как шаровые

скопления и центральные звездные скопления в галактических центрах. Это столкновительные системы, в которых звездные орбиты подвержены релаксации двух тел, происходящей за характерное время, масштабируемое как $N / \log N$ в зависимости от числа частиц. Для более точного учета ключевых динамических процессов, таких как коллапс ядра, сегрегация массы, парные взаимодействия, испарение и приливное размывание, крайне важно моделировать такие системы по крайней мере в течение одного времени релаксации. Прямое моделирование N -тел является наиболее точным методом моделирования эффектов парной релаксации. Однако оно масштабируется как $O(N^2)$ на временной шаг, и поскольку эволюция, обусловленная парной релаксацией, требует интегрирования на временном интервале, пропорциональном $N / \log N$, общая вычислительная стоимость такого моделирования масштабируется примерно как $O(N^3 / \log N)$, что делает моделирование больших столкновительных систем чрезвычайно затратным по времени и вычислительным ресурсам. В данной работе мы представляем результаты тестирования и анализа производительности нового GPU-сервера вычислительного кластера Астрофизического института им. В. Г. Фесенкова на базе 10 карт NVIDIA RTX 4090, а также оцениваем возможности его масштабирования. Определен верхний предел оптимального количества карт для моделирования движения N -тел в зависимости от числа частиц. Проанализированы причины существования такого предела и предложены пути его преодоления.

Ключевые слова: моделирование N -тел, параллельные вычисления, прямое интегрирование, столкновительные системы, звездные скопления

Благодарность: Исследование проведено в рамках Гранта № AP23487846 («Исследование связи механизма образования волокнистых структур Вселенной с процессом образования спиральных структур в дисковых галактиках»), Программ № BR24992807 («Развитие казахстанской цифровой среды для астрономических исследований объектов ближнего и дальнего космоса в рамках международной сети виртуальных обсерваторий»), № BR24992759 («Разработка концепции первого казахстанского орбитального окололунного телескопа – Этап I») и № BR21881880 («Создание астрономического исследовательского хаба с использованием казахстанских и международных оптических инструментов и инновационных технологий»), финансируемых МНВО РК.

Введение.

Столкновительные звездные системы, такие как шаровые скопления и плотные центральные звездные скопления, принципиально отличаются от бесстолкновительных систем, таких как галактики (Binney, et al., 2011). Их долгосрочная эволюция регулируется релаксацией двух тел – процессом, в котором кумулятивные слабые гравитационные столкновения постепенно перераспределяют энергию и угловой момент между звездами (Chandrasekhar, 1941). В столкновительных системах звездные орбиты не остаются фиксированными в течение длительных временных масштабов из-за частых слабых взаимодействий

с другими звездами. Это приводит к ключевым эволюционным процессам, таким как сегрегация массы, коллапс ядра и двойной нагрев (Heggie, et al., 2002). Все эти процессы требуют отслеживания индивидуальных звездных взаимодействий. Для плотных звездных систем время релаксации пропорционально количеству тел как $N / \log N$ (Binney, et al., 2011) и намного короче возраста самой системы, что делает эволюцию, обусловленную релаксацией, значимой.

Достигнув (или превысив) времени релаксации t_{relax} , можно изучать: 1) коллапс ядра: плотное звездное скопление испытывает гравитационно-тепловую неустойчивость, что приводит к сжатию ядра; 2) массовую сегрегацию: когда более массивные звезды погружаются в центр из-за обмена энергией; 3) формирование и взаимодействие двойных звезд: жесткие двойные звезды могут образовываться и влиять на эволюцию скопления; 4) испарение и приливное размывание: звезды постепенно убегают из-за диффузии скоростей; 5) аккрецию звезд на черную дыру: звезды падают в конусе потерь или замедляются газообразным диском (Just, et al., 2012, Kennedy, et al., 2016). Если моделирование не достигает t_{relax} , можно наблюдать только переходную фазу, упуская самосогласованную долгосрочную эволюцию скопления.

Поскольку релаксация двух тел является по своей сути дискретным стохастическим процессом, ее нельзя точно смоделировать с использованием бесстолкновительных приближений, таких как уравнение Власова или древовидные коды N -тел (например, Barnes-Hut, Gadget-2, Makino, 2004, Springel, 2005), которые сглаживают мелкомасштабные столкновения. Прямое моделирование N -тел является единственным методом, который может в необходимой мере разрешить эти эффекты, так как оно по определению (на микроуровне) точно учитывает все парные взаимодействия естественным образом, включая эффекты более высокого порядка, такие как близкие столкновения, бинарные и иерархические системы. Прямое интегрирование не требует предположений о распределении скоростей или частоте столкновений и позволяет моделировать динамически активные области, где такие приближения нарушаются (например, фазы после коллапса ядра).

Главным недостатком прямого моделирования N -тел является его высокая вычислительная стоимость и сложность масштабирования из-за его базового принципа учитывать все возможные парные взаимодействия. Гравитация является дальнедействующей силой, поэтому каждая частица в системе “чувствует” гравитационное воздействие от каждой другой частицы в системе на каждом временном шаге, что приводит к вычислительным затратам, которые масштабируются как $O(N^2)$ на временной шаг. Такое масштабирование делает прямое моделирование больших систем крайне ресурсоемким с точки зрения вычислительных затрат. Напротив, бесстолкновительные методы, такие как древовидные коды и методы сеток частиц, достигают улучшенного масштабирования $O(N \log N)$ путем аппроксимации дальнедействующих сил. Однако, как уже упоминалось, эти методы не подходят для столкновительных систем, где релаксация двух тел играет доминирующую роль в их динамической эволюции.

Помимо высокой вычислительной стоимости расчета сил, существует необходимость в использовании малых временных шагов в областях с сильными гравитационными полями, что дополнительно усложняет моделирование. Тесные сближения между звездами приводят к быстрым изменениям скорости, требуя высокого разрешения по времени для поддержания численной точности. Для обеспечения такого адаптивного разрешения по времени, необходимо использовать интеграторы с адаптивными временными шагами, а также интеграторы более высокого порядка, такие как интегратор Эрмита (Makino, 1991, Nitadori, et al., 2008). Однако это повышает алгоритмическую сложность кода, снижает возможность его параллелизации и, как следствие, ведет к дополнительным вычислительным издержкам. Кроме того, прямое моделирование N -тел подвержено численным ошибкам, которые накапливаются за миллионы временных шагов, влияя на сохранение энергии и долгосрочную стабильность интегрирования. Специальные методы, такие как схемы регуляризации для близких взаимодействий и симплектические интеграторы, позволяют уменьшить эти ошибки, однако они также повышают вычислительную сложность, усложняют и ограничивают возможности параллелизации.

Квадратичный рост вычислительных затрат на расчет гравитационных сил и логарифмическое увеличение времени интеграции до достижения времени релаксации приводят к тому, что общие вычислительные затраты при моделировании долговременных эффектов в столкновительных звездных системах масштабируются как $O(N^3 / \log N)$. Такое масштабирование в конечном итоге делает долгосрочное моделирование больших скоплений невозможным за пределами определенного N . Последнее зависит от имеющейся вычислительной мощности и главным образом определяется мощностью графических ускорителей (GPU-карт). Цель этой статьи – оценить, где находится этот предел для GPU-сервера SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2 на базе 10 GPU-карт RTX 4090. Данный сервер обладает пиковой теоретической производительностью 826 FP32-терафлопс и представляет собой одно из самых высокопроизводительных решений, доступных сегодня на рынке. Данный сервер был приобретен Астрофизическим институтом им. В. Г. Фесенкова (FAI) в 2024 году в рамках проектов SA2¹, VO2¹ и CLT¹ для решения массивных вычислительных задач общего назначения, включая решение задач прямого интегрирования движения N -тел. В данной статье дается оценка того, как теоретические характеристики этого сервера соотносятся с практическими, оценивается рациональность концентрации такого количества GPU-карт в одном сервере, а также дается оценка, что возможно для кластерных решений на базе таких серверов. Эта информация является значимой для дальнейшего развития вычислительного кластера FAI, для планирования и реализации научных проектов, использующих прямое моделирование N -тел, а также, может быть, полезна всем, кто заинтересован в построении высокопроизводительных вычислительных систем для целей прямого численного моделирования.

Данная статья организована следующим образом: в разделе 2 мы описываем

нашу методику испытаний и измерений, в разделах 3 и 4 мы представляем полученные результаты и анализируем их, и, наконец, в разделе 5 мы делаем выводы.

2 Материалы и методы

2.1 GPU-сервер

В конце 2024 года вычислительный кластер FAI получил обновление в рамках грантового и программно-целевого финансирования. В рамках проекта AP23487846 и двух программ BR24992807 и BR24992759 были приобретены 10 графических ускорителей NVIDIA GeForce RTX 4090 (Рисунок 1, слева) в двух-слотовом серверном исполнении с турбинной системой охлаждения и установлены в имеющийся GPU-сервер SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2 (Рисунок 1, справа). Этот сервер имеет 13 PCIe 5.0 x16 слотов и поддерживает установку до 10 полноразмерных FHFL GPU-карт с пассивным или активным охлаждением.

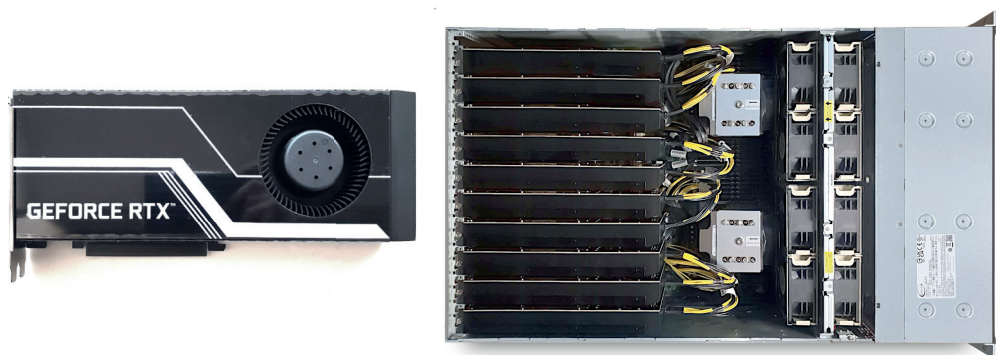


Рисунок 1. Слева: двухслотовая OEM-модификация игровой карты NVIDIA RTX 4090 для использования в дата-центрах. Справа: Вычислительный сервер SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2 с установленными десятью двухслотовыми GPU-картами NVIDIA RTX 4090

Скорость коммутации карт имеет важное значение во многих вычислительных задачах, в частности, в моделировании движения N-тел, где после каждого шага интегрирования на распределенных вычислительных устройствах требуется синхронизация данных между ними. Если такая коммуникация занимает больше времени, чем вычисления, то возникает простой распределенных вычислительных устройств. Как результат, вычислительная мощность устройств не складывается при их совместном использовании. Благодаря высокой скорости (максимально возможной для PCIe 5.0 интерфейса) и низким задержкам, коммутация GPU-карт через материнскую карту (через PLX-свитчи) решает эту проблему, позволяя использовать все GPU-карты как единое устройство с суммированной производительностью.

Установка такого количества карт на один сервер стала возможной благодаря китайскому кастомному решению по модификации данных карт в двух-слотовый форм-фактор. Главным преимуществом установки всех карт на один сервер является обеспечение неблокируемой коммуникации карт между собой со скоростью до 64

Гб/с без использования дорогостоящего 400/800 гигабитного RDMA-коммутатора и RDMA-карт. Типичные GPU-сервера, входящие в вычислительный кластер FAI (такие как GPU SuperWorkstation 7049GP-TRT и GPU SuperServer SYS-740GP-TNRT), имеют 4 PCIe слота и для организации на их основе неблокирующей коммуникации 10 GPU-карт потребуется 5 таких GPU-серверов – по две GPU и по две RDMA-карты на сервер, а также RDMA-коммутатор на 10 портов 800 гигабит. Стоимость такого решения в 3 раза превосходит стоимость одного сервера SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2, вмещающего сразу 10 GPU-карт. В теории такой сервер с 10 картами NVIDIA RTX 4090 должен обеспечить общую производительность 826 терафлопс в операциях с одинарной точностью (FP32) и до 13212 терафлопс в тензорных операциях с разрежением (FP08). До появления этого сервера на кластере FAI удавалось объединять в параллельную работу максимум две современные GPU карты из-за их 3-х слотового форм-фактора. Поэтому с появлением возможности объединить в параллельную систему до 10 GPU-карт, вычислительные возможности для параллельного моделирования должны возрасти в 5 раз.

2.2 ϕ GPU

Для бенчмаркинга нашего GPU-сервера был использован параллельный код ϕ GPU¹, используемый для прямого интегрирования N-тел. Данный код основан на схеме интегрирования Эрмита высокого порядка (4-го, 6-го и 8-го) и использует блочную иерархическую схему индивидуального выбора временного шага (HITS) (Aarseth, 2003).

Распараллеливание ϕ GPU осуществлено с помощью библиотеки MPI (Message Passing Interface) по аналогии с ранее опубликованной версией кода ϕ GRAPE (Harfst, 2007). Общее число частиц равномерно распределяется между вычислительными узлами с помощью MPI_Bcast(), после чего на каждом узле локально вычисляются силы для так называемых "активных" частиц. Затем результаты синхронизируются между узлами с использованием MPI_Allreduce() для получения полных значений сил, действующих на каждую частицу системы. Вычисления на каждом узле выполняются на графических процессорах с использованием библиотеки CUDA, причем каждый MPI-процесс использует отдельный GPU, что позволяет эффективно задействовать многопроцессорные узлы с несколькими графическими ускорителями.

При тестировании мы остановились на схеме интегрирования Эрмита 8-го порядка, так как именно она обеспечила наивысшие показатели производительности.

Генерация начальных условий была произведена согласно сферической модели Пламмера (Dejonghe, 1987), при этом модель нормирована в стандартных N-body единицах (Hénon, 1971), где приняты значения $G = M_{\text{tot}} = 1$, $E_{\text{tot}} = -1/4$.

В данной работе мы определяем время вычислений, необходимое для достижения одного времени релаксации. Время релаксации t_{relax} для заданного числа частиц N определяется стандартным выражением (Aarseth, 2003):

$$t_{\text{relax}} \simeq \frac{0.14N}{\ln(0.4N)} t_{\text{cross}}, \quad (1)$$

где время пересечения t_{cross} можно получить из соображения размерностей, используя теорему вириала:

$$t_{\text{cross}} = R/v, \quad R \sim (2T)^{-1/2}, \quad v \sim T^{1/2}, \quad T = 1/4 \implies t_{\text{cross}} = 2\sqrt{2}. \quad (2)$$

Оценка производительности и времени выполнения моделирования встроена в код ϕ GPU. Производительность рассчитывается по формуле:

$$\text{Performance} = \frac{\gamma N \sum N_{\text{act}}}{T_{\text{tot}}}, \quad (3)$$

где γ – параметр, определяющий количество операций с плавающей запятой (FLOP) на одну частицу за одно взаимодействие за один шаг в методе Эрмита (в случае 8-го порядка $\gamma = 144$), $\sum N_{\text{act}}$ – общее число индивидуально интегрируемых “активных” частиц, T_{tot} – общее время, складывающееся из времени, затраченного на расчет сил и MPI-коммуникации.

Все вычисления в ϕ GPU выполняются с двойной точностью (FP64), что особенно важно для моделирования гравитационной динамики, где накопление ошибок может существенно повлиять на точность результатов. Однако потребительские GPU-карты, такие как NVIDIA RTX 4090, обладают крайне низкой производительностью при выполнении операций FP64, поскольку их архитектура ориентирована в основном на вычисления с одинарной точностью (FP32).

Чтобы обойти это ограничение, в ϕ GPU применяется специальный метод разбиения операций с двойной точностью на последовательность операций с одинарной точностью. Такой подход позволяет эмулировать FP64-вычисления, используя более производительные FP32-операции. В результате, производительность кода ϕ GPU, фактически отражает скорость выполнения операций FP32, а не FP64-производительность.

Код ϕ GPU также использует параллелизацию с помощью OpenMP на CPU, что влияет на общую производительность. Одним из ключевых параметров производительности является количество потоков CPU, используемых для работы с одной GPU. Мы используем 32 потока OpenMP на каждую GPU-карту, что позволяет эффективно загружать процессорные ресурсы и минимизировать время ожидания данных между вычислительными блоками. Использование OpenMP помогает ускорить выполнение вспомогательных вычислений на CPU, что особенно важно при больших объемах данных. Однако прирост производительности зависит от архитектуры CPU и количества доступных ядер. В идеальном случае она растет с увеличением числа потоков, но после определенного предела насыщается из-за ограничений пропускной способности памяти и синхронизации потоков.

3 Результаты и обсуждение

Первым делом нами была измерена производительность индивидуальных GPU-карт для того, чтобы убедиться, что все карты имеют одинаковую производительность в приемлемых пределах. Для этого были проведены тестовые симуляции N -тел с использованием кода ϕ GPU на индивидуальных GPU-картах с геометрически возрастающим числом частиц: $N = 128K, 256K, \dots, 8192K$, где $K = 1024$. Время интегрирования было ограничено 1 N -body единицей. На Рисунке 2 представлены результаты проведенного тестирования, где можно видеть, что все карты имеют примерно одинаковую производительность, в среднем достигая плато в 37 терафлопс в операциях с одинарной точностью (45% от теоретически возможных 82.6 терафлопс). Производительность GPU-карт варьируется (главным образом из-за TurboBoost'a), и некоторые карты (3, 7) имеют более высокую производительность, другие – более низкую (1). Вместе с тем, как видно из рисунка, отклонение от среднего для всех GPU-карт не превышает 5% (внутренняя серая зона на графике). Рост производительности с числом моделируемых частиц обусловлен увеличением количества активных частиц, которое ведет к увеличению доли вычислительных операций в сравнении с долей R/W-операций.

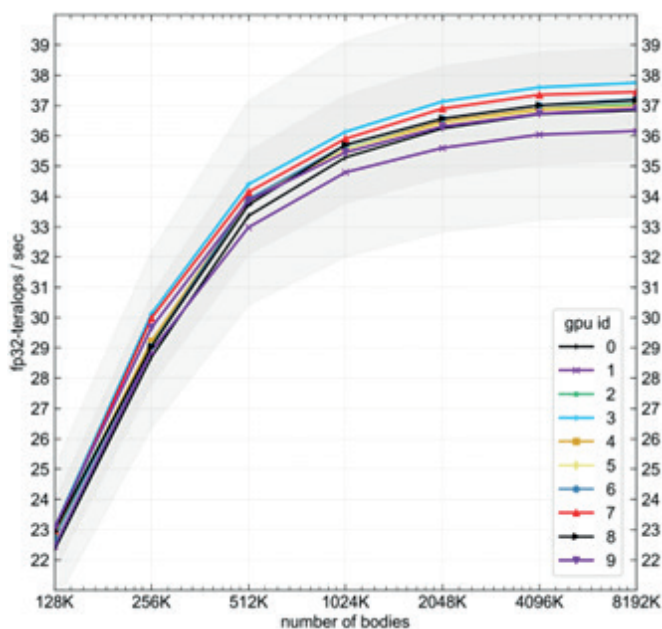


Рисунок 2. Производительность индивидуальных GPU-карт (показано линиями разного цвета) как функция числа моделируемых частиц.

Как можно видеть из Рисунок 3, при одновременном задействовании двух и более GPU-карт, а также при увеличении числа моделируемых частиц, производительность ожидаемо увеличивается, однако не прямо пропорционально числу карт. Так при моделировании 8192K частиц с помощью 10 карт удалось

достигнуть фактической производительности свыше 330 терафлопс. Данный результат является рекордным. Так еще в 2011 году для достижения такой производительности требовалось 1536(!) GPU-карт Fermi Tesla C2050 (Berczik, et al., 2011). Это обстоятельство знаменует более чем 150-кратный рост вычислительной мощности GPU-карт за 14 лет, соответствуя примерно 2-кратному удвоению производительности каждые два года и, следовательно, означает актуальность закона Мура (Moore, 1965) до сих пор.

При совместной работе общая производительность GPU-карт достигает 40% от теоретического максимума. При этом индивидуальные карты в совместном режиме работают на 89% от их фактической производительности в индивидуальном режиме, т.е. только 11% уходит на коммуникацию (синхронизацию данных между картами). Последнее означает, что общая производительность при больших N растет все более и более пропорционально числу карт, приближаясь к идеальному масштабированию. Однако, как можно видеть из правого графика на Рисунке 3, с меньшим количеством частиц масштабирование ухудшается и при достижении определенного количества GPU-карт фактически прекращается (закон Амдала, Amdahl, 1967), а при еще большем увеличении числа карт общая производительность начинает падать из-за роста объема коммуникаций. Для значений $N \leq 128K$ использование более одной GPU-карты практически не имеет смысла, а при $N = 512K$ не имеет смысла использовать больше 6-7 карт.

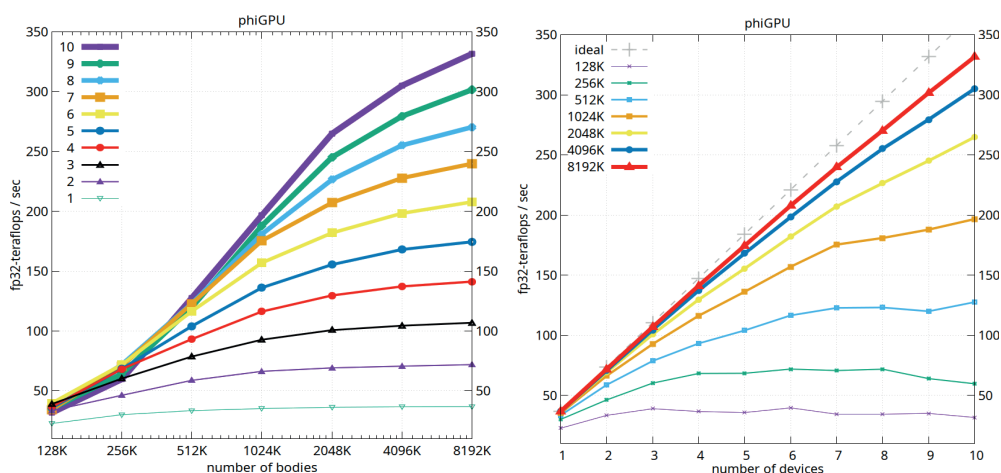


Рисунок 3. Совместная производительность карт как функция числа моделируемых частиц (слева) и числа карт (справа).

Как было сказано во введении, в случае прямого моделирования движения N -тел большое значение имеет возможность достижения времени релаксации. Тот факт, что на 10 картах RTX 4090 можно проводить моделирование 8192K частиц с рекордной скоростью, еще не означает, что прямое моделирование такого числа частиц до времени релаксации с таким количеством таких карт возможно за резонное время (скажем, за 1 месяц). На Рисунке 4 на левой панели показана

связь времени моделирования со степенью релаксации системы для разного числа частиц N и числа GPU-устройств. Как можно видеть, время моделирования 8192K частиц на одной GPU-карте до одного времени релаксации составляет порядка 1000 лет, а при использовании 10 карт – 100 лет. Это время значительно превышает резонное – 1 месяц. Это означает, что прямое численное моделирование 8192K тел на 10 картах RTX 4090 не имеет практического смысла.

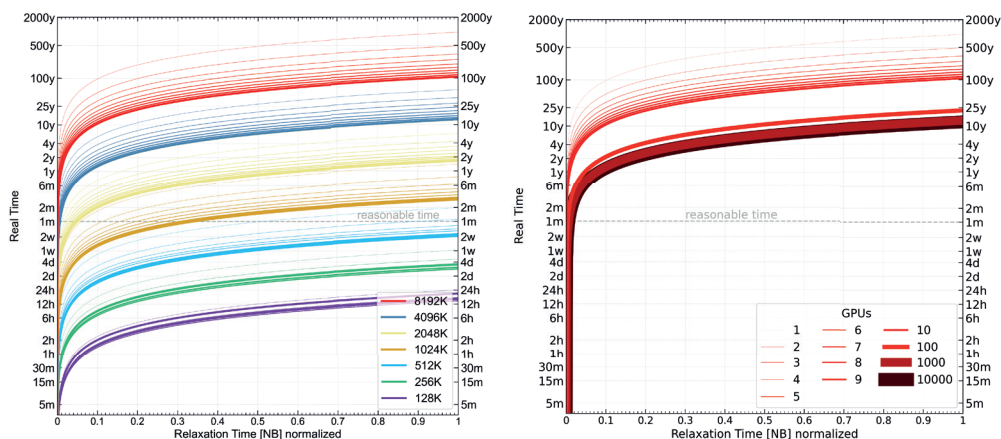


Рисунок 4. Слева: Экстраполяция времени моделирования, необходимого для достижения одного времени релаксации, в зависимости от числа частиц и GPU-карт. Справа: Экстраполяция времени моделирования в случае масштабирования вычислительной системы до большего количества карт. Цветом обозначено число моделируемых частиц, а толщиной – количество одновременно задействованных GPU-карт.

Исходя из полученных данных, можно также задаться вопросом: сколько предположительно потребуется GPU-карт, чтобы достигнуть времени релаксации, соответствующее разумным затратам по времени? Для ответа на этот вопрос мы произвели экстраполяцию времени моделирования как функции числа GPU-карт, основанную на характере масштабирования производительности по первым 10 картам (см. Рисунок 5, левый график). Фитинг выполнен с применением модифицированной формы закона Амдала (Amdahl, 1967), которая, в отличие от классического варианта, учитывает временные затраты на коммуникации между GPU-картами в виде некоторой функции, пропорциональной количеству GPU-карт.

$$S_p = \frac{1}{\alpha + (1 - \alpha)/n_{gp} + \beta \cdot \ln(n_{gp})}, \quad (4)$$

где α – доля времени затрачиваемая на выполнение части кода, неподдающегося распараллеливанию, $(1 - \alpha) / n_{gp}$ – доля времени, затрачиваемая на выполнение параллельной части кода с использованием n_{gp} – графических процессоров, $\beta \cdot \ln(n_{gp})$ – доля времени, которое затрачивается на коммуникацию/синхронизацию

данных между параллельными процессами (меньшие значения β указывают на меньшие затраты). В зависимости от топологии вычислительного сервера и принципа обмена данными между узлами накладные издержки на коммуникацию/синхронизацию между GPU-картами могут иметь различный характер: квадратичный $\beta \cdot n_{\text{gp}}^2$, когда все устройства напрямую обмениваются данными друг с другом (полносвязная топология), линейный $\beta \cdot n_{\text{gp}}$, когда каждая вычислительная единица должна обмениваться данными с центральным узлом, или, как в нашем случае при использовании библиотеки MPI, логарифмический $\beta \cdot \ln(n_{\text{gp}})$, когда устройства формируют иерархическое дерево коммуникаций. Использование такого алгоритма позволяет обеспечить коммуникацию всех со всеми и при этом избежать квадратичного роста сложности. Как можно видеть из Рисунка 5, прирост производительности происходит явно нелинейно, кривые имеют тенденцию выполаживаться с ростом числа карт и быстрее обращаться вспять с уменьшением числа моделируемых частиц.

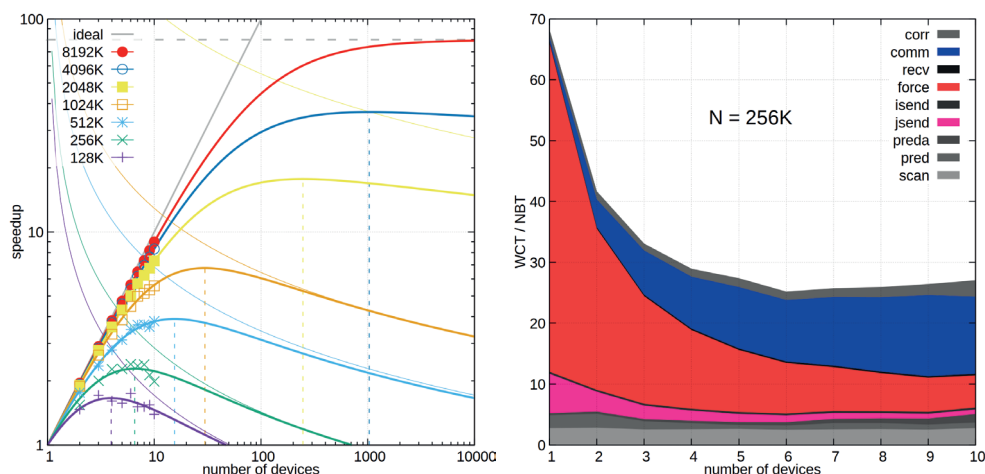


Рисунок 5. Экстраполяция масштабирования производительности с ростом числа используемых GPU-карт (левый график) и распределение времени выполнения различных этапов кода в зависимости от числа используемых GPU-карт (правый график).

Выполаживание кривых обусловлено непараллельной частью кода, наличие которой накладывает верхний предел $1 / \alpha$ на максимальный прирост производительности (серая пунктирная линия на графике), а обращение вспять – коммутационными задержками для малых N (тонкие цветные линии показывающие $1 / (\beta \cdot \ln(n_{\text{gp}}))$ – верхний предел прироста производительности со стороны коммуникаций). Вертикальные пунктирные линии показывают точки перегиба, после которых добавление новых карт полностью теряет смысл. Прямое измерение времени выполнения различных частей кода (правый график на Рисунке 5) подтверждает, что с ростом n_{gp} коммуникации (comm) начинают доминировать над параллельной частью кода, а именно над вычислением силы (force). В какой-то момент с добавлением нового устройства увеличение времени коммуникаций

начинает превышать уменьшение времени вычисления силы, в результате чего общее время выполнения задачи начинает расти. Следует обратить внимание, что серийная часть кода phiGPU, складывающаяся из определения активных частиц (scan), предсказания для всех (pred) и активных (preda) частиц, отправки на GPU активных и полевых частиц (isend и jsend, соответственно), получения сил от GPU-карт (recv) и коррекции/улучшения активных частиц (corr), практически не изменяется.

Используя полученную экстраполяцию ускорения, можно оценить перспективы достижения времени релаксации для $N = 8192K$ (правый график на Рисунке 4). Как можно видеть, из-за предела, обусловленного серийной частью кода, даже при использовании 10 000 GPU-карт, оно не достижимо за разумное время (1 месяц).

4 Заключение

Произведено тестирование производительности нового вычислительного GPU-кластера Астрофизического института им. В. Г. Фесенкова на базе 10 карт NVIDIA RTX 4090. По итогам анализа результатов тестирования сделаны следующие выводы и заключения:

1. Налицо существенный прогресс в развитии вычислительных технологий: возможное вчера (в 2012 году) на 1536 GPU-картах, сегодня (в 2025 году) возможно с использованием 10 карт. Такой уровень роста производительности согласуется с законом Мура.

2. Скорость синхронизации карт при прямом моделировании N -тел имеет критическое значение для малых $N \leq 1024K$. Так, из-за роста коммуникационных задержек не имеет смысла использовать более 4 GPU-карт для $N = 128K$, более 6 для $N = 256K$, более 12 карт для $N = 512K$. Для ускорения расчетов с таким числом частиц требуется существенное ускорение скорости синхронизации данных. Возможным решением может быть использование GPU-карт на SXM-сокетах и/или таких технологий как NVIDIA-Link, которые позволяют существенно ускорить обмен данными между GPU-устройствами. Однако такие решения значительно дороже PCIe-решений и, как правило, эксклюзивно применяются для решения задач машинного обучения.

3. Для больших $N (\geq 4096K)$ главным ограничивающим фактором для крупномасштабной параллелизации является серийная часть кода. В этом случае коммуникационные задержки уже не играют существенной роли, однако с задействованием большого числа GPU-карт ($n_{gp} > 100$) параллельная часть сокращается настолько, что становится меньше серийной, и прирост производительности асимптотически уменьшается. Возможным решением здесь могут быть: рост скорости выполнения последовательных операций (например, увеличение в будущем тактовой частоты вычислительных процессоров) и/или работы, направленные на распараллеливание серийной части кода.

4. Для нашей системы из 10 GPU-карт RTX 4090, мы нашли оптимальным использовать ее с $N = 512-1024K$. Это максимальное число частиц, при котором возможно достигнуть времени релаксации за разумное время и при этом

обеспечить высокую эффективность одновременного использования 10 GPU-карт. При больших N время для достижения времени релаксации становится слишком большим (больше года), а при меньших N использование 10 карт становится неэффективным. Принимая во внимание тот факт, что количество звезд в типичном шаровом звездном скоплении составляет $N \sim 10^6$, мы считаем набор из 10 карт GTX4090 необходимым и достаточным для их моделирования.

5. В случае обеспечения неблокируемой коммутации GPU-карт на уровне пропускной способности интерфейса PCIe4 (например, при использовании 400Гб RDMA-коммутации) и задействования порядка 100 карт возможно моделирование $N = 2048K$ до времени релаксации.

6. Для прямого моделирования большего числа частиц $N \geq 4096K$ до времени релаксации за разумное время (меньше месяца) требуется существенное сокращение серийной части кода ($\ll 1\%$), задействование большого числа карт (>100) и неблокируемая коммутация всех карт на уровне $>400Гб$.

References

- Aarseth S.J. (2003) Gravitational N-body simulations: tools and algorithms. — Cambridge University Press. (in English)
- Amdahl G.M. (1967) Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities. Proceedings of the April 18-20, spring joint computer conference. — P. 483-485. (in English)
- Berczik P. et al. (2011) High performance massively parallel direct N-body simulations on large GPU clusters. International conference on high performance computing, 2011. — P. 8-18. (in English)
- Binney J., Tremaine S. (2011) Galactic dynamics. — Princeton university press. (in English)
- Chandrasekhar I.S. (1941) The Time of Relaxation of Stellar Systems. Astrophysical Journal, vol. 93. — P. 285. (in English)
- Dejonghe H.A. (1987) completely analytical family of anisotropic Plummer models. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — vol. 224. — No. 1. — P. 13-39. (in English)
- Harfst S. et al. (2007) Performance analysis of direct N-body algorithms on special-purpose supercomputers. New Astronomy. — vol. 12. — No. 5. — P. 357-377. (in English)
- Heggie D.C., Hut P. (2002) The Gravitational Million-Body Problem. — Cambridge University Press. — P. 8. (in English)
- Hénon M. (1971) The Monte Carlo method. International Astronomical Union Colloquium. — Cambridge University Press, vol. 10. — P. 151-167. (in English)
- Just A. et al. ENHANCED ACCRETION RATES OF STARS ON SUPERMAS — No. 1. — P. 51. (in English)
- Kennedy G.F. et al. (2016) Star-disc interaction in galactic nuclei: orbits and rates of accreted stars. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — vol. 460. — No. 1. — P. 240-255. (in English)
- Makino J. (1991) Optimal order and time-step criterion for Aarseth-type N-body integrators. Astrophysical Journal, Part 1 (ISSN 0004-637X), vol. 369, March 1. — P. 200-212. (in English)
- Makino J. (2004) A fast parallel treecode with GRAPE. Publications of the Astronomical Society of Japan. — vol. 56. — No. 3. — P. 521-531. (in English)
- Moore G.E. et al. (1965) Cramming more components onto integrated circuits. Electronics. — vol. 38. — No. 8. — P. 114-117 (in English)
- Nitadori K., Makino J. (2008) Sixth-and eighth-order Hermite integrator for N-body simulations. New Astronomy. — vol. 13. — No. 7. — P. 498-507. (in English)
- Springel V. (2005) The cosmological simulation code GADGET-2. Monthly notices of the royal astronomical society. — vol. 364. — No. 4. — p. 1105-1134. (in English)

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the Central Asian Academic Research Center LLP

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the journals of the Central Asian Academic Research Center LLP implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The Central Asian Academic Research Center LLP follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the Central Asian Academic Research Center LLP.

The Editorial Board of the Central Asian Academic Research Center LLP will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www.nauka-nanrk.kz

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

Ответственный редактор *А. Ботанқызы*

Редакторы: *Д.С. Аленов, Т. Апендиев*

Верстка на компьютере *Г.Д. Жадырановой*

Подписано в печать 3.09.2025.

Формат 60x88¹/₈.

18,0 п.л. Заказ 3.

«Central Asian Academic Research Center» LLP

Алматы, Қонаев к-сі, 142