УДК 004.65:620.22

АНАЛИЗ ФУНКЦИОНАЛА БАЗ ДАННЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ В СОВРЕМЕННЫХ ПЛАТФОРМАХ ДЛЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Чураков А.В., Камлач П.В., Онгарбаева А.И.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь, anchurakov@bsuir.by

Аннотация: современные базы данных о свойствах материалов составляют цифровые каталоги с физическими, химическими, механическими и термодинамическими природными веществами, газом, тканями и средами биологических объектов. Однако для ряда задач целесообразно использовать единую платформу, поскольку это снижает риск потери данных при переносе моделей и упрощает воспроизводимость расчётов в программном обеспечении, которое содержит в свободной доступе все материалы, необходимые для разработки инновационных технологий, особенно если изучается моделирование электрической характеристики и влияние внешних воздействий на ткани биологических объектов.

Ключевые слова: базы данных о свойствах материалов, MatWeb, Materials Project, Total Materia, COMSOL Multiphisics, SOLIDWORKS, SIM4LIFE SCIECE 9.0 Zurich MedTech AG (ZMT).

ВВЕДЕНИЕ

Современные базы данных свойств материалов – это цифровые каталоги с физическими, химическими, механическими и термодинамическими характеристиками веществ, газов, тканей организмов. Их можно классифицировать как общие и популярные базы данных и специализированные базы данных, привязанных для работы к определенным платформам. Популярные это MatWeb – крупная онлайн-база, содержащая более 200 000 видов материалов, включая металлы, пластики, керамику и полупроводники. Materials Project – научный проект с открытым доступом, который прогнозирует и собирает свойства неорганических соединений для разработки новых технологий. Total Materia – одна из самых полных мировых баз данных по металлам, полимерам и композитам с миллионами записей и диаграмм. Мы проведем краткий сравнительный анализ специализированных баз данных свойств материалов в ведущих платформах для моделирования, в которых реализовано моделирование электрических характеристик и влияния внешних воздействий.

Наиболее применяемая для обучения и работы COMSOL Multiphisics [1,2] имеет встроенную библиотеку, и базовая версия программы с модулями расширения включают свыше 2500 материалов, включая металлы, полимеры, полупроводники, минералы и газы. В течение создания модели свойства необходимого материала достаточно просто найти и подгрузить. Свойства материалов (теплопроводность, плотность, электропроводность, вязкость) могут задаваться как константы, так и как функции от температуры, давления или других параметров. Также интегрированы специализированные базы, и дополнительные модули добавляют профильные базы данных [2]. Например, модуль «Микрофлюидика» включает библиотеку жидкостей и газов (Liquids and Gases), а модули химических реакций поддерживают формат CHEMKIN. Что касается пользовательских материалов: возможно вручную создавать собственные материалы, задавать любые формулы и таблицы свойств, а также сохранять их в личную или корпоративную базу данных [4]. Существенным недостатком является отсутствие свойств материалов тканей биологических объектов и организма человека и использует только все доступные физические ядра центрального процессора (CPU) по умолчанию для ускорения расчетов. Второе активно применяемое в работе и обучении это программное обеспечение SOLIDWORKS. Оно предоставляет обширную базу, необходимых для расчета, данных по свойствам материалов, которую, в случае необходимости, очень просто дополнить новыми материалами [3]. Доступна обширная база материалов с физическими свойствами – металлов, сплавов, пластиков и т.д. Однако все поля свойств материалов отображаются серым цветом и недоступны для редактирования (рисунок 1).

Несмотря на наличие обширной базы материалов в SOLIDWORKS, возникает ситуация, когда необходимо создать материал со свойствами, отличающимися от материалов из базы SOLIDWORKS. По умолчанию база данных материалов закрыта для редактирования пользователями. Если вы являетесь пользователем услуг по подписке SOLIDWORKS с лицензией SOLIDWORKS Simulation, доступ к веб-порталу материалов SOLIDWORKS можно получить из диалогового окна Материал. Веб-портал материалов SOLIDWORKS представляет собой обширную базу материалов, поддерживаемую компанией Matereality LLC. Свойства материалов тестируются компанией Matereality LLC и

проверяются с помощью опубликованных исследований и каталогов, поставляемых различными поставщиками материалов. База данных доступна для поиска по типу исследования моделирования и модели материала. Замечательно то что свойства материалов, загружаемых с веб-портала SOLIDWORKS Materials, можно редактировать. Для исследований усталости, когда загружены данные кривых S-N, Simulation преобразует полученные максимальные значения напряжения в переменные напряжения. Данные кривой S-N хранятся в программе Simulation в формате *.sldmat. Для вязкоэластичных материальных моделей, когда загружены данные соотношения модуля расслабления (G) и кривой времени, Simulation сохраняет только данные кривой, меньшие, чем заданное значение модуля сдвига. Однако есть и следующие недостатки, которые ограничивают применение. Доступ к веб-порталу материалов SOLIDWORKS доступен только пользователям услуг по подписке SOLIDWORKS, имеющим лицензию SOLIDWORKS Simulation Professional или лицензию SOLIDWORKS Simulation Premium. Частично доступен пользователям услуг по подписке SOLIDWORKS, имеющим лицензию SOLIDWORKS Simulation Standard. Эти клиенты могут только скачать материалы со свойствами линейного статического анализа и исследования усталости (ограниченный набор полного набора доступных материалов). Также недостатком является то, что пользователям услуг по подписке недоступен SOLIDWORKS, имеющим только лицензию SOLIDWORKS (SOLIDWORKS Standard, SOLIDWORKS Professional или SOLIDWORKS Premium) [3,5].

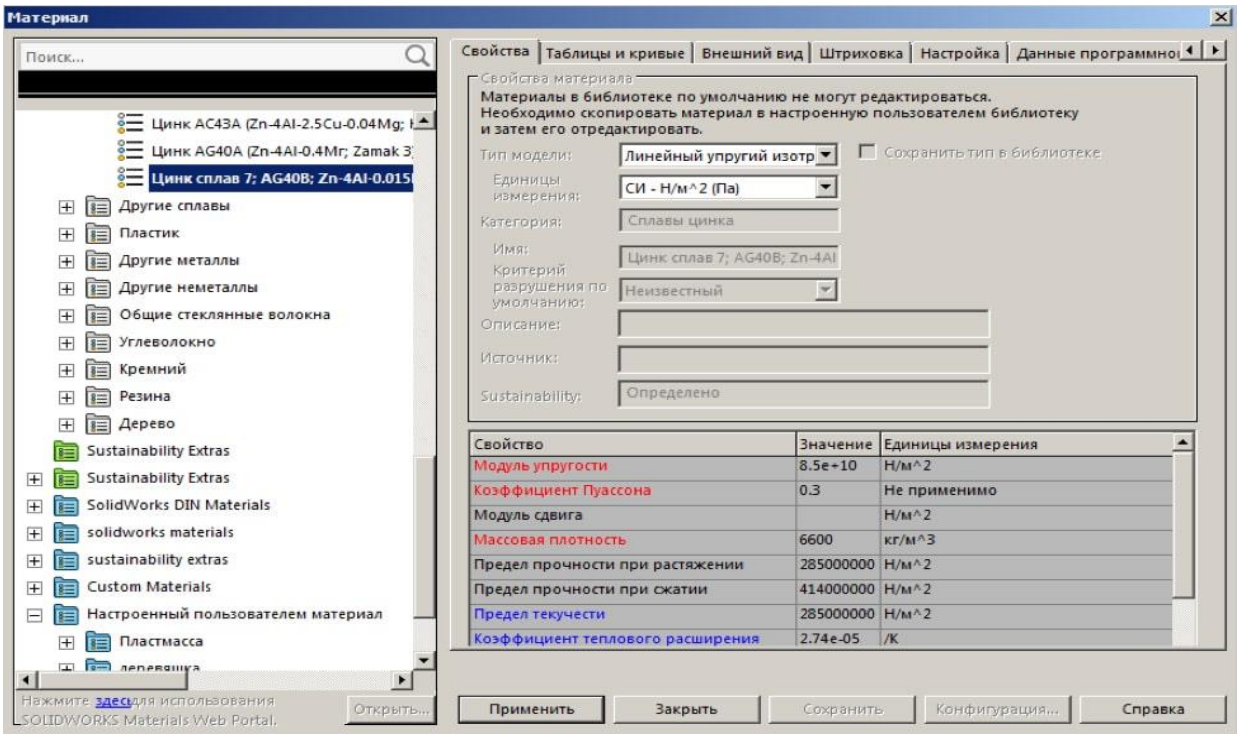


Рисунок 1. Интерфейс выбора материала в SOLIDWORKS

Остановимся на функционале платформы SIM4life Zurich MedTech AG (ZMT) с которыми наш университет успешно сотрудничает последние 8 лет. База материалов в Sim4Life – это интегрированная библиотека физических свойств тканей и инженерных материалов. Её основу составляет база данных свойств биологических тканей IT'IS Foundation (IT'IS Tissue Properties Database), которая является широко используемым и регулярно обновляемым источником рекомендованных параметров биологических тканей для биомедицинских вычислений и моделирования. База данных автоматически сопоставляет физические параметры с анатомическими моделями из библиотек Virtual Population (ViP) и Virtual Zoo (ViZoo) (рисунок 2) [6,7].

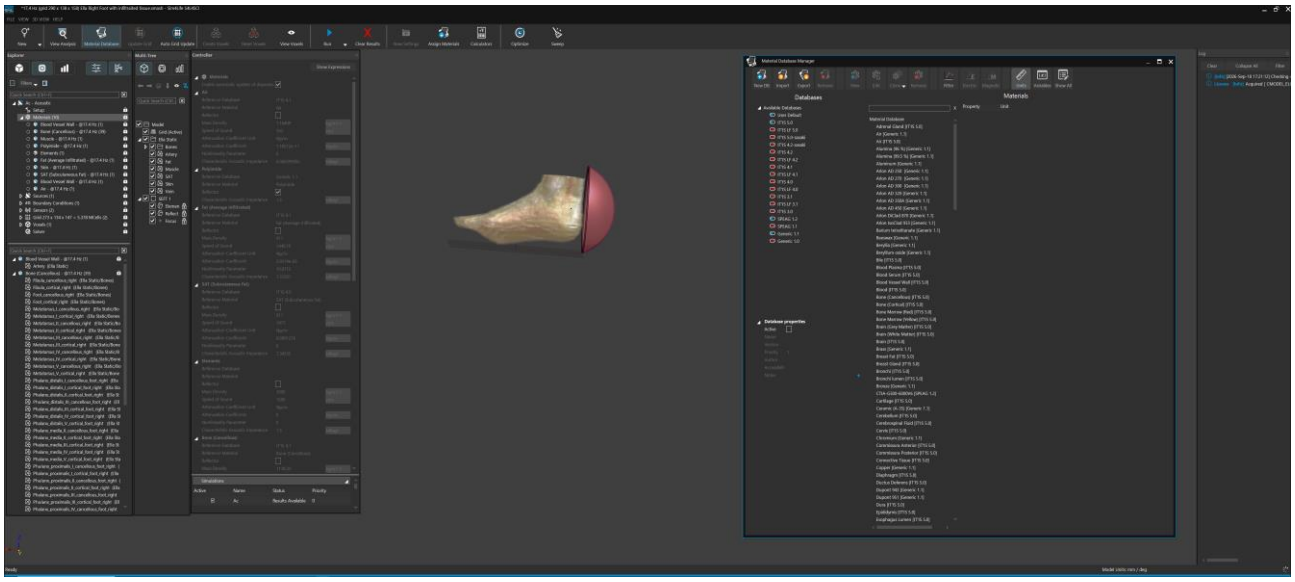


Рисунок 2. Интерфейс выбора материала в SIM4LIFE SCIECE 9.0

Библиотека содержит регулярно обновляемые параметры для более чем 100 типов биологических тканей и различных материалов. Это электромагнитные свойства: диэлектрическая проницаемость, тангенс угла потерь, проводимость и магнитная проницаемость. Поддерживаются частотно-зависимые (дисперсионные) модели Дебая, Лоренца и Друде для широкополосных расчетов методом конечных разностей во временной области (FDTD). Тепловые свойства: теплоемкость, теплопроводность и скорость метаболического тепловыделения. Свежие версии (начиная с Tissue DB V5.0 в Sim4Life V9.0) также содержат данные о массовой доле воды в тканях, что критически важно для точного температурного моделирования. Содержит следующие гидродинамические и перфузионные параметры: константы перфузии крови для моделирования терморегуляции по уравнению Пеннеса. Акустические свойства: скорость звука, плотность и коэффициенты затухания для симуляции ультразвукового воздействия (например, HIFU). Механические свойства: плотность массы и параметры упругости. Инженерные материалы: помимо биологических тканей, база включает характеристики проводников, диэлектриков, метаматериалов и специализированных сред (например, тестовых жидкостей-фантомов SPEAG для оценки SAR). Ключевые инструменты управления материалами является Material Database Manager: это встроенный менеджер, позволяющий переключаться между версиями баз (например, низкочастотными и высокочастотными наборами данных), редактировать существующие и создавать собственные (Custom) материалы. В платформе реализован инструмент DISPFIT (GA-Based Dispersive Fitting Tool): модуль аппроксимации на базе генетических алгоритмов. Он позволяет импортировать текстовые файлы с экспериментальными измерениями и автоматически строить гладкие частотно-зависимые кривые для симулятора. Можно производить вычисления анизотропия на основе MPT: Sim4Life поддерживает импорт карт тензора диффузии (DTI) для назначения анизотропной электропроводности (например, в тканях головного мозга или мышцах). Для расширенной информации о структуре данных или загрузить автономные файлы базы (в форматах Excel, ASCII или .db для ручного импорта) можно напрямую на официальном сайте IT'IS Foundation [6,7]. Крайне важно, что вычисления сложных математических расчетах фактически во всех решателях проводятся и выполняются с помощью технологию CUDA для графических процессоров NVIDIA. GPU-ускорение может сделать возможным выполнение демонстрационных или учебных расчётов в ограниченное время; фактическая длительность зависит от сложности задачи и аппаратной конфигурации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ баз данных позволяется сделать следующие выводы. Онлайн-базы данных существенно различаются по охвату материалов, составу параметров, условиям лицензирования и возможностям интеграции с CAE-платформами химической промышленности и радиоэлектроники, и формат данных проблематично использовать в платформах для моделирования. Платформы Стандартные библиотеки COMSOL и SOLIDWORKS ориентированы прежде всего на инженерные материалы и не предоставляют столь же специализированной и тесно интегрированной базы параметров биологических тканей, как Sim4Life и для отдельных специализированных материалов и биологических сред может потребоваться самостоятельный ввод, верификация или импорт параметров, что в полной мере не позволяют проводить сложные математические вычисления

электрических характеристик и влияние внешних воздействий на фантомах биологических объектов, т.к. не поддерживают технологию CUDA для графических процессоров NVIDIA. Все задачи по изучению влияния внешних воздействий, моделирование источников различных внешних воздействий, прототипов приборов, вычисление и анализ результатов моделирования в реальном времени целесообразно делать в SIM4life, чьи базы данных материалов наиболее полные и содержат максимум информативности для научных коллективов, а поддержка CUDA-ускорения может существенно сократить время расчёта при сохранении заданной точности, определяемой моделью и настройками численного решения, делает научно-практические работы и процесс обучения высокопроизводительными.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Авторы благодарят руководство Zurich MedTech AG (ZMT) за предоставленное программное обеспечение и поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Чураков, А. В. Принципы моделирования и проектирования приборов магнито- и ультразвуковой терапии : учеб.-метод. пособие / А. В. Чураков. – Минск : БГУИР, 2019. – 147 с. : ил. – ISBN 978-985-543-453-6.

[2] Чураков, А. В. Современное программное обеспечение и основные методологические подходы для мультифизического моделирования медицинских и биологических исследований / А. В. Чураков // Инновационные технологии в медицине. – 2018. – Т. 6, № 3. – С. 250–258.

[3] SOLIDWORKS Resource Center [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://www.solidworks.com/ru/support/resource-center. – Дата доступа: 19.09.2026.

[4] Introduction to COMSOL Multiphysics [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://cdn.comsol.com/doc/5.4/IntroductionToCOMSOLMultiphysics.ru_RU.pdf. – Дата доступа: 19.09.2026.

[5] SOLIDWORKS Simulation [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://www.solidworks.com/product/solidworks-simulation. – Дата доступа: 19.09.2026.

[6] Sim4Life: Science [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://sim4life.swiss/science. – Дата доступа: 19.09.2026.

[7] Sim4Life: Anatomical Device Modeling [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://sim4life.swiss/use-cases/anatomical-device-modeling. – Дата доступа: 19.09.2026.

ANALYSIS OF THE FUNCTIONALITY OF MATERIAL PROPERTIES DATABASES IN MODERN PLATFORMS FOR PHYSICAL-MATHEMATICAL SIMULATION

A.V. Churakov, P.V. Kamlach, A.I. Ongarbayeva

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Republic of Belarus,
anchurakov@bsuir.by

Abstract: modern databases on material properties comprise digital catalogues of the physical, chemical, mechanical and thermodynamic properties of natural substances, gases, tissues and biological media. However, the optimal approach is to carry out single-platform modelling and solve all problems within a single software package that provides open access to all the materials required for the development of innovative technologies, particularly when modelling the electrical characteristics and the influence of external factors on the tissues of biological objects.

Keywords: material property databases, MatWeb, Materials Project, Total Materia, COMSOL Multiphysics, SOLIDWORKS, SIM4LIFE SCIENCE 9.0, Zurich MedTech AG (ZMT).