

динамический коэффициент регулирования и квадратичный интегральный показатель качества, проводится проверка на грубость в заданном диапазоне варьирования параметров объекта, а также строится график зависимости относительного времени регулирования от отношения  $\tau/\sum T$ , с заданным диапазоном и шагом.

Параметры настройки ПИ и ПИД регуляторов рассчитывались по методам: оптимального модуля; апериодической устойчивости; максимальной степени устойчивости[1]; аппроксимационной максимальной степени устойчивости[1]; оптимальным по критерию максимальной степени устойчивости[1]; Скогестада[2]; Зейгеля – Никольса[3]; «AMIGO»[3]; Кохена - Куна[3]; «Lambada»[3]; Шеделея[3].

При анализе сравнивались прямые показатели качества, обеспечиваемые САУ синтезированными различными методами. Проведено исследование зависимости численных значений прямых показателей качества от величин отношения времени запаздывания к суммарной постоянной времени модели исходного объекта.

В результате сформулированы рекомендации, о том каким методом производить параметрический синтез САУ при заданном отношении величины запаздывания к суммарной постоянной времени модели объекта для обеспечения наилучших показателей качества проектируемой системы управления.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Загрий Г.И.; Шубландзе А.М. Синтез систем управления на основе критерия максимальной степени устойчивости. М.: Энергоиздат, 1988.
2. Skogestad, S. Simple analytic rules for model reduction and PID controllers tuning [Text] / S. Skogestad // Modeling, Identification and Control. – 2004. – Vol. 25. – N 2. – P. 85-120.
3. Astrom, K.J. Revisiting the Zeigler-Nichols step response method for PID control [Text] / K.J. Astrom, T. Hagglund // Journal of process control. – 2004. – Vol. 14. – N 6. – P. 1163-1175.

#### РАЗРАБОТКА ЛАБОРАТОРНОГО СТЕНДА ПРИВОДА ПОСТОЯННОГО ТОКА

В.В. Глушенков, С.Н. Ливенцов

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [vladislav.glushenkov@gmail.com](mailto:vladislav.glushenkov@gmail.com)

Настоящая работа посвящена разработке лабораторного стенда привода постоянного тока, который предназначен для изучения студентами принципа действия привода постоянного тока, а также для изучения устройства привода и входящих в него элементов.

Современный электропривод — это совокупность множества электромашин, аппаратов и систем управления ими. Он является основным потребителем электрической энергии (до 60 %) и главным источником механической энергии в промышленности.[1] Лабораторный стенд включает в себя: сетевой фильтр, систему синхронизации с сетью, систему импульсно-фазового управления (СИФУ), двигатель постоянного тока и тахогенератор. Основное применение СИФУ находят в широко распространенных тиристорных преобразователях, для регулирования скорости электродвигателей, температуры электронагревателей или других технологических параметров.[2]

При разработке лабораторного стенда был проведен анализ литературы на соответствующие темы, в рамках которого были определены ключевые моменты при разработке стенда привода постоянного тока. Проведен анализ классического привода постоянного тока. Была выполнена разработка структурной, функциональной и принципиальной схем, а также были выбраны элементы необходимые для реализации данного привода.

В дальнейшей работе будет выполнена сборка данного стенда и его тестирование.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Промышленная электроника: Учебник для ВУЗов. Горбачев Г.Н., Чаплыгин Е. Е. Энергоатомиздат 1988.
2. В. Г. Гусев, Ю. М. Гусев. Электроника и микропроцессорная техника. – 3-е изд., перераб. и доп. – М.:Вышш. шк., 2005. – 790 с.

### РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ РАСЧЕТА ГЕОМЕТРИИ АТОМНЫХ СТРУКТУР

А.А. Золотарев, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: [art707@tpu.ru](mailto:art707@tpu.ru)

Для синтеза новых материалов с заданными свойствами необходимо знать их структурные особенности, основные свойства и характеристики. Применение компьютерного моделирования и численных методов расчета позволяет получить большое количество данных об атомной структуре и свойствах материалов перед проведением экспериментальных исследований.

Для компьютерного моделирования и расчета свойств молекул методом Хартри-Фока-Рутаана необходимо знать координаты каждого атома в декартовом пространстве. Вследствие этого ведется разработка программного обеспечения формирующего координаты атомов в молекуле на основе структурной формулы молекулы методами молекулярной механики и оптимизации ее геометрии.

Метод молекулярной механики позволяет находить геометрические характеристики и энергии многоатомных систем. В рамках метода молекулярной механики полная энергия исследуемой структуры представляет собой сумму энергетических термов: энергия химического взаимодействия, энергия валентных углов, энергия торсионного взаимодействия, энергия ван-дер-ваальсового взаимодействия, энергия электростатического взаимодействия. В основе метода молекулярной механики лежит следующая математическая модель: атомы представляются в виде шаров, связанных между собой пружинами или стержнями. Энергии длин связей и валентных углов описываются законом Гука [1].

Оптимизация молекулярной геометрии позволяет изучить структуру молекулы и ее энергию в свободном состоянии. Суть оптимизации геометрии заключается в повторном (многократном) вычислении энергии молекулы и вариации структурных параметров так, чтобы достичь структуру, соответствующей минимуму полной энергии молекулы. Вариация обычно включает в себя первоначальный расчет энергии при начальной структуре, оценку градиента энергии, выбор новых структурных параметров на основе информации о градиенте, и проверку выполнения условий прекращения процесса оптимизации [2].

В результате было разработано программное обеспечение, которое формирует структурную формулу молекулы, проверяет ее на корректность, устанавливает начальные координаты атомов в молекуле и проводит оптимизацию начальной геометрии. Полученные координаты атомов являются исходными данными для расчетов методом Хартри-Фока-Рутаана.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. – Нижний Новгород.: ННГУ, 2007 – 84 с.
2. Блатов В.А. Полуэмпирические методы квантовой химии. – Самара.: Универс-групп, 2005 – 32 с.