

Разложение функции ЭП в ряд Фурье

Выбрал параметры из variant2.txt и немного изменил их, чтобы получились три молекулы с разным количеством атомов

#F model function: 25,2.7,6.7+35,3.1,8.2+30,2.7,9.6+25,2,17+40,2.1,22.3+30,2,24 (*)

Эта функция соответствует одной трехатомной молекуле, одной двухатомной и одному отдельному атому. Представляет собой сумму шести гауссовских функций (ГФ).

Первое число каждой ГФ - величина (высота) пика;

Второе - ширина пика;

Третье - точка максимума пика.

1. Создание функции ЭП

По параметрам (*) скриптом compile-func.py была создана функция ЭП ([func.txt](#)) и построен ее график.

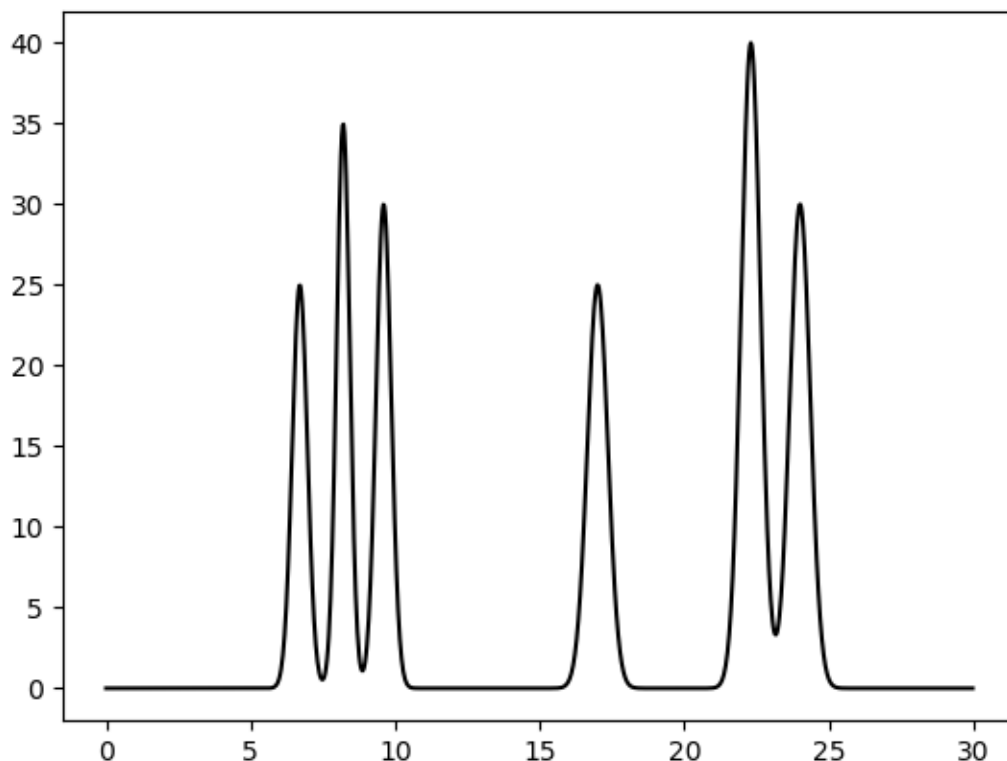


Рис 1. Смоделированная функция ЭП

2. Расчет параметров сигнала, моделирующих экспериментальные данные: амплитуды и фазы

Скриптом func2fourier.py была разложена функция в ряд Фурье и получены гармоники ([harms.txt](#)). В последствии, этим же скриптом будут задаваться шумы.

3. Восстановление функции ЭП по амплитудам и фазам части сигналов

Восстановление осуществляется скриптом `fourier2func.py`
Выбор гармоник осуществляется скриптом `fourier-filter.py`
Восстановленная функция обозначена пунктиром.
- По всем гармоникам (499):

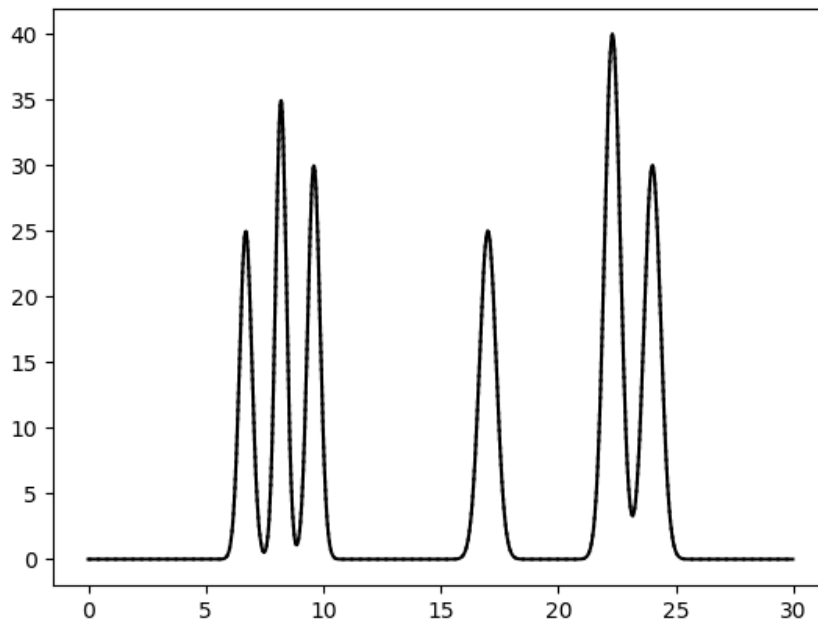


Рис 2. Функция, восстановленная (идеально) по всем гармоникам.

- Поиск гармоники, дающей идеальное восстановление (по первым N гармоникам)

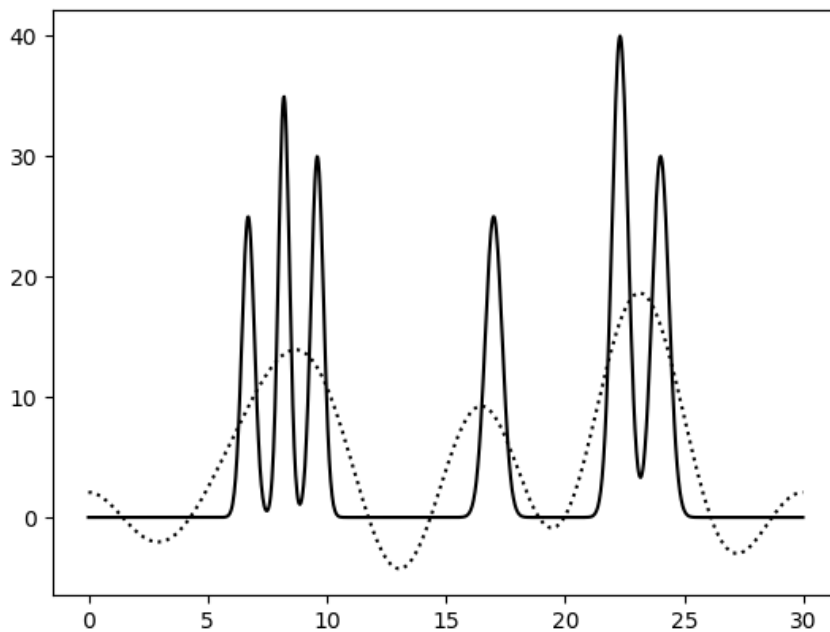


Рис 3а. Восстановление по первым шести гармоникам

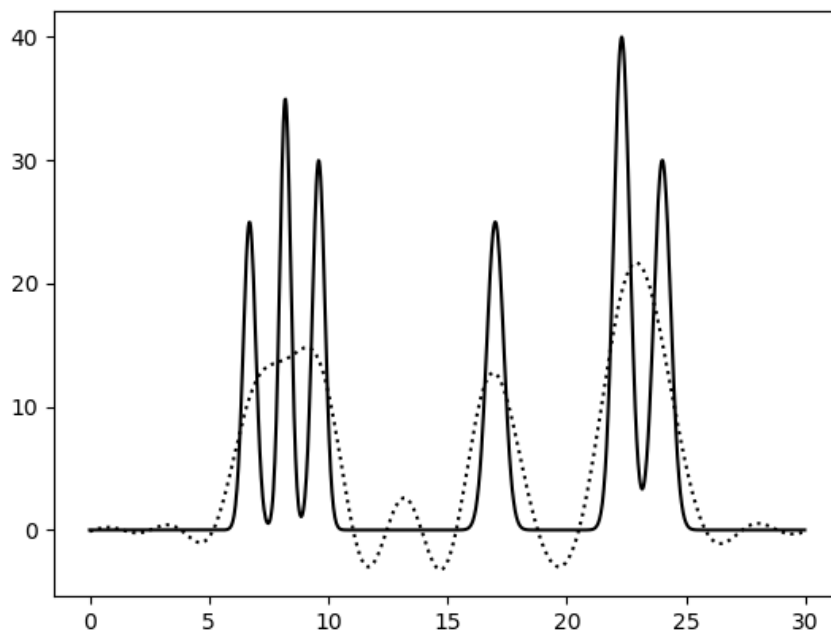


Рис 3б. Восстановление по первым 11 гармоникам

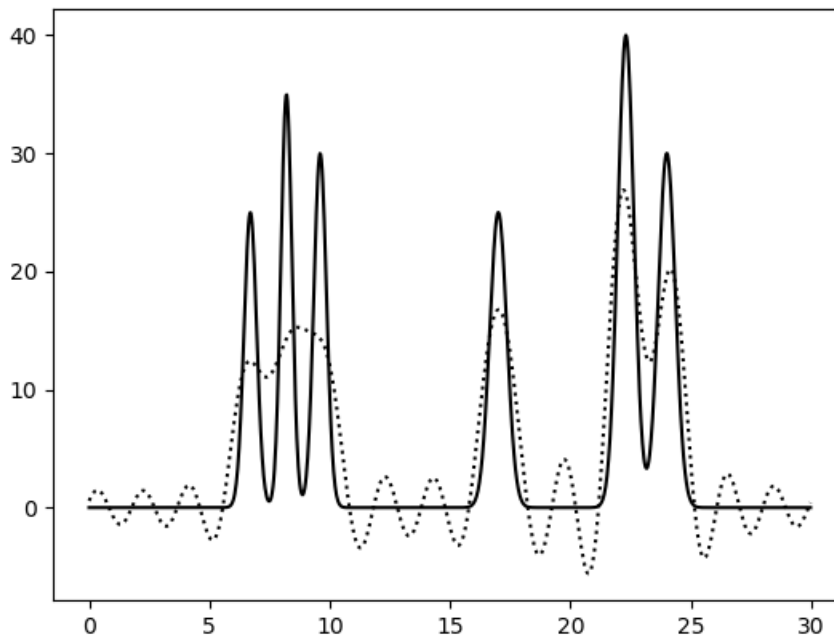


Рис 3в. Восстановление по первым 16 гармоникам

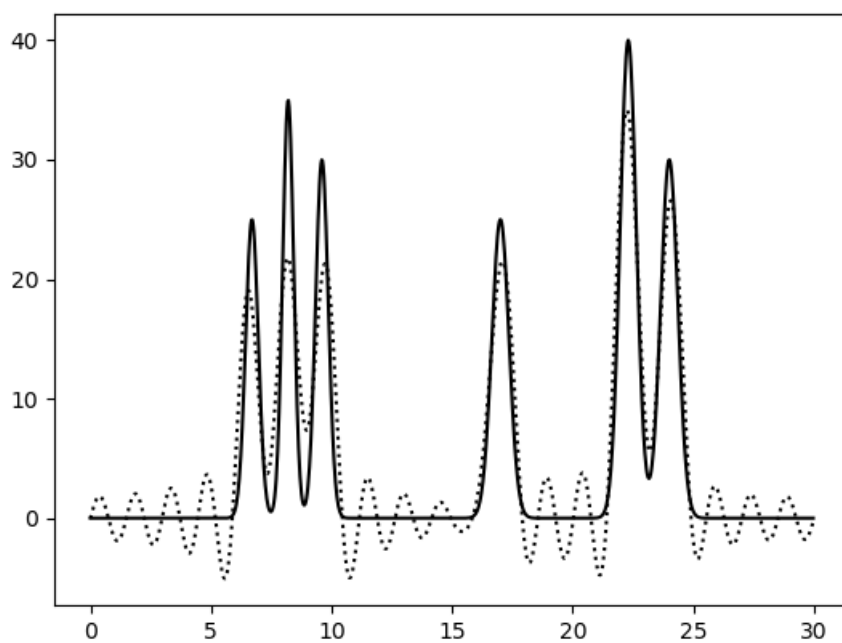


Рис 3г. Восстановление по первым 21 гармоникам

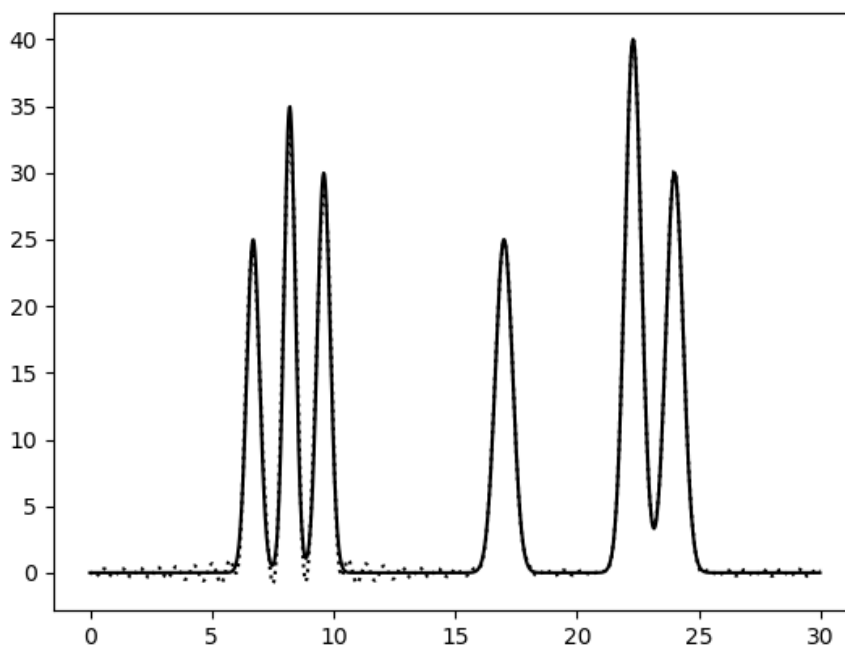


Рис 3д. Восстановление по первым 41 гармоникам

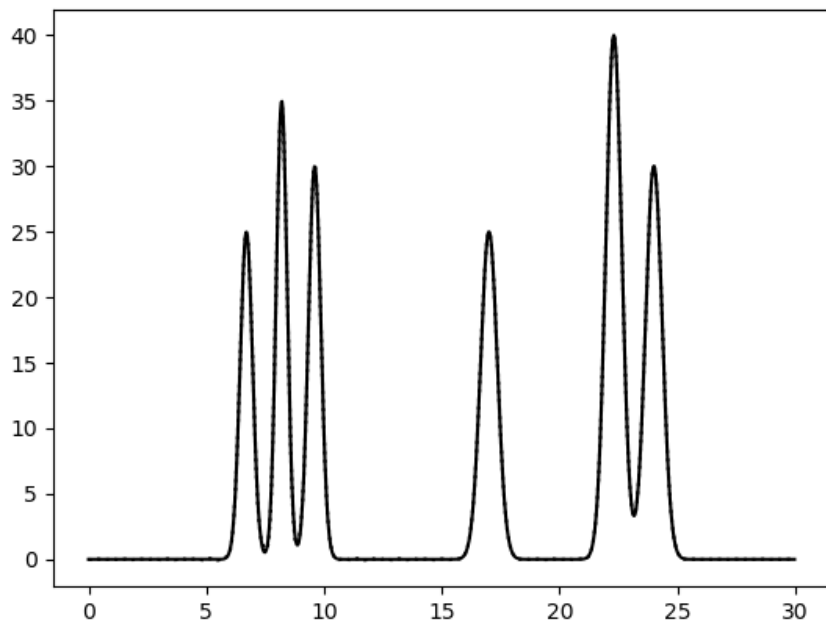


Рис 3е. Восстановление по первым 51 гармоникам

По 51 гармонике функция восстанавливается практически идеально. В дальнейшем будет использовано это число гармоник.

Зашумления по амплитуде (F) и фазе (φ)

1) $F = 0\%$; $\varphi = 25\%$; В большой степени зашумляет параллельную оси OX часть графика. При большом уровне шума по фазе может случиться так, что нельзя будет отличить шум от пиков.

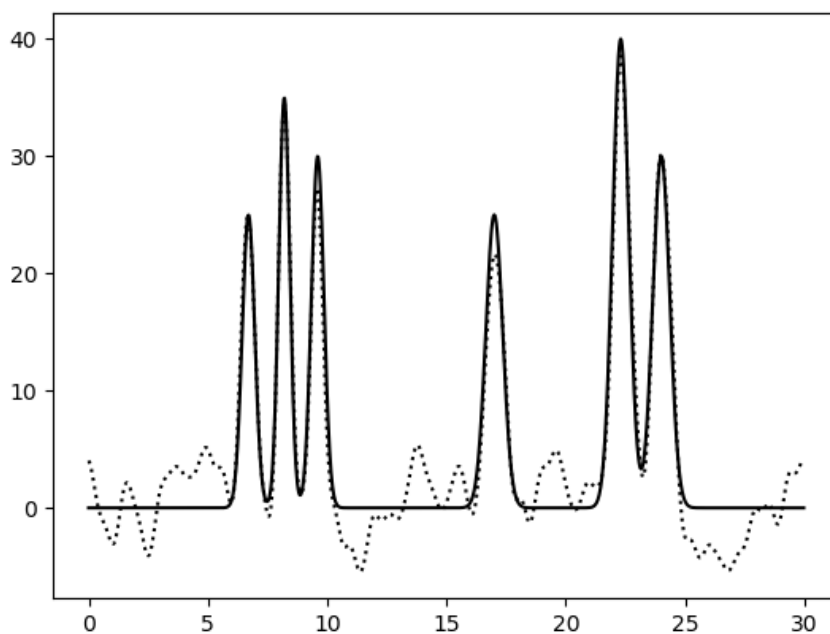


Рис 4а. Восстановление по данным с зашумленной на 25% фазой
 2) $F = 25\%$; $\varphi = 0\%$; В большей степени влияет на высоту пиков, чем на зашумленность промежутков между ними. Это менее критично, чем сдвиг по фазе, поскольку пики хорошо определяются.

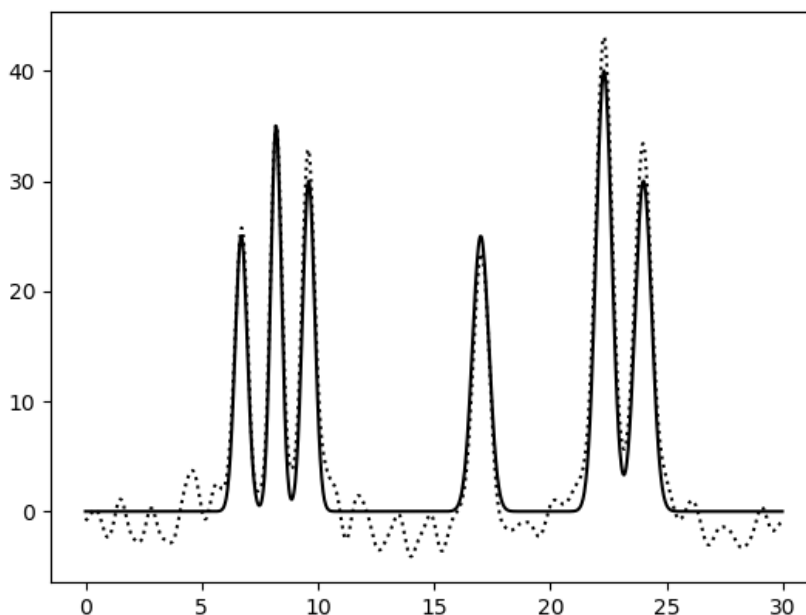


Рис 4б. Восстановление по данным с зашумленной на 25% амплитудой

3) $F = 25\%$; $\varphi = 25\%$; Пики различаемы, но при большом уровне шума пики, вероятно, станут неотличимы от шума.

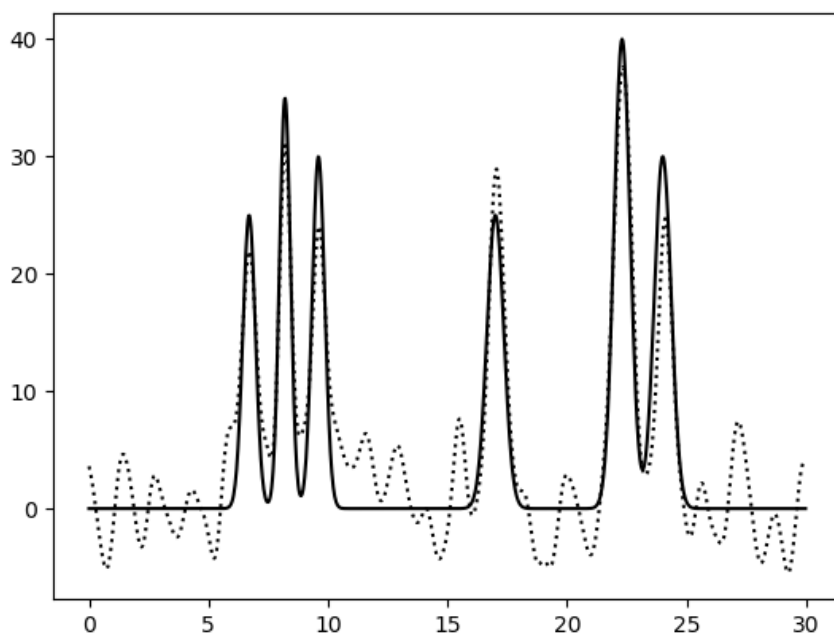


Рис 4в. Восстановление по данным с зашумленными на 25% фазой и амплитудой
В целом, функция довольно устойчива к шумам, но при больших значениях оных пики будут неразличимы.

4. Восстановление по неполным наборам гармоник

1) Восстановление без начальных гармоник

1-50 (без 1);

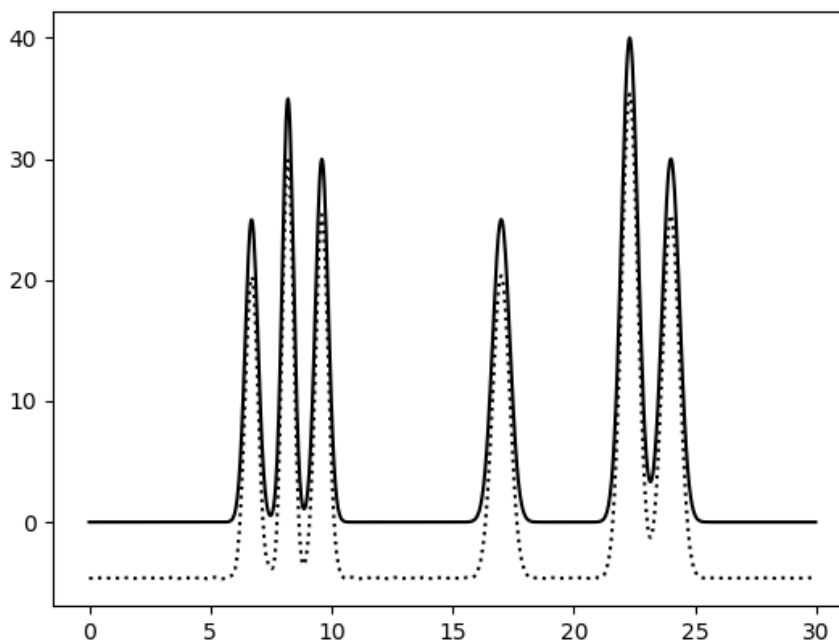


Рис 5а. Восстановление по гармоникам, исключая первую

2-50 (без 2);

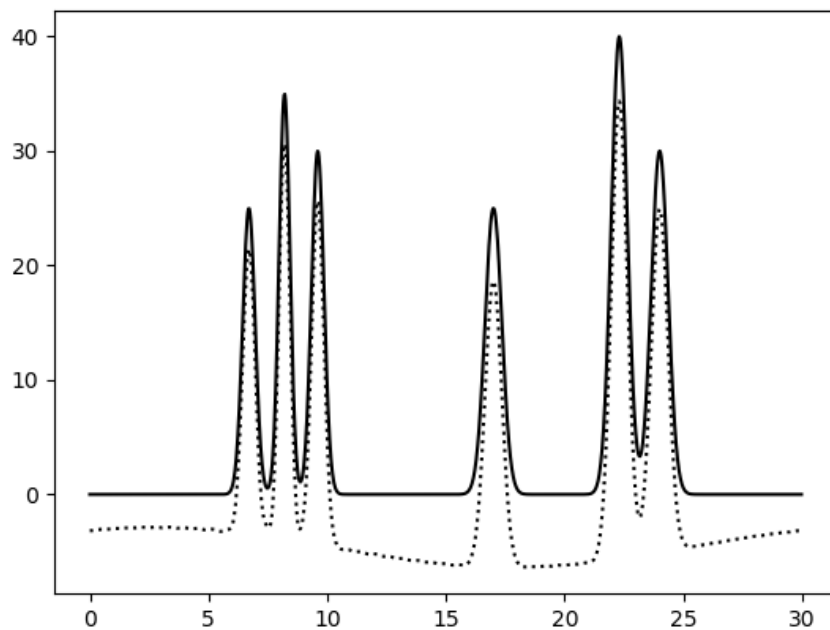


Рис 5б. Восстановление по гармоникам, исключая первые две

5-50 (без 5);

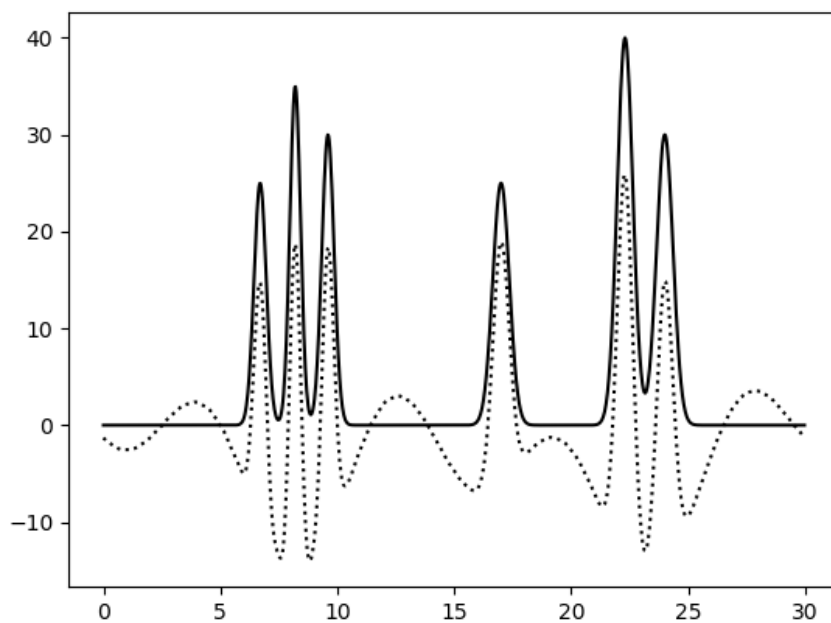


Рис 5в. Восстановление по гармоникам, исключая первые 5

Поскольку первая гармоника представляет собой свободный член ряда Фурье, при ее удалении функция смещается по оси ОУ. При удалении последующих гармоник из функции вычитается сумма синусоид и пики постепенно сливаются с шумом.

2) Восстановление без пяти(10%) гармоник "из середины"

0-10,16-50;

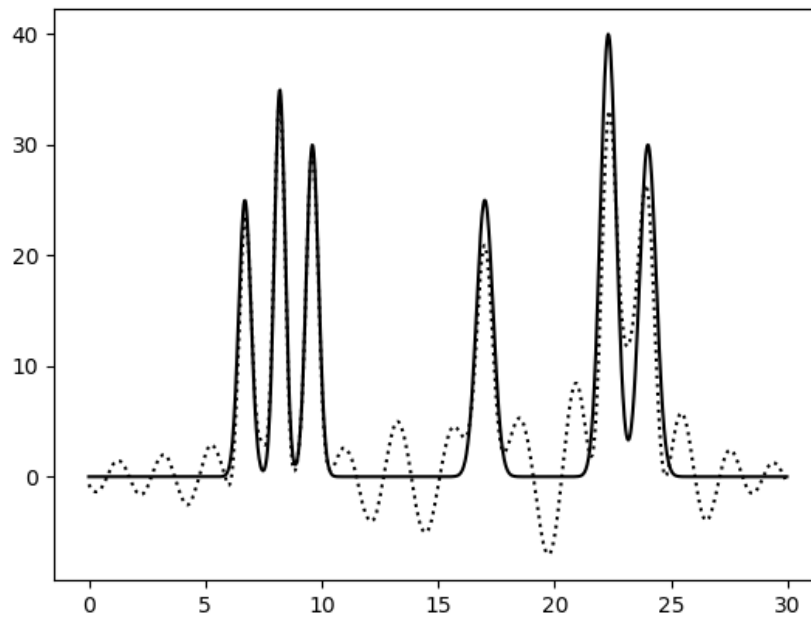


Рис 6а. Восстановление по гармоникам, исключая 11-15 гармоники

0-25,31-50;

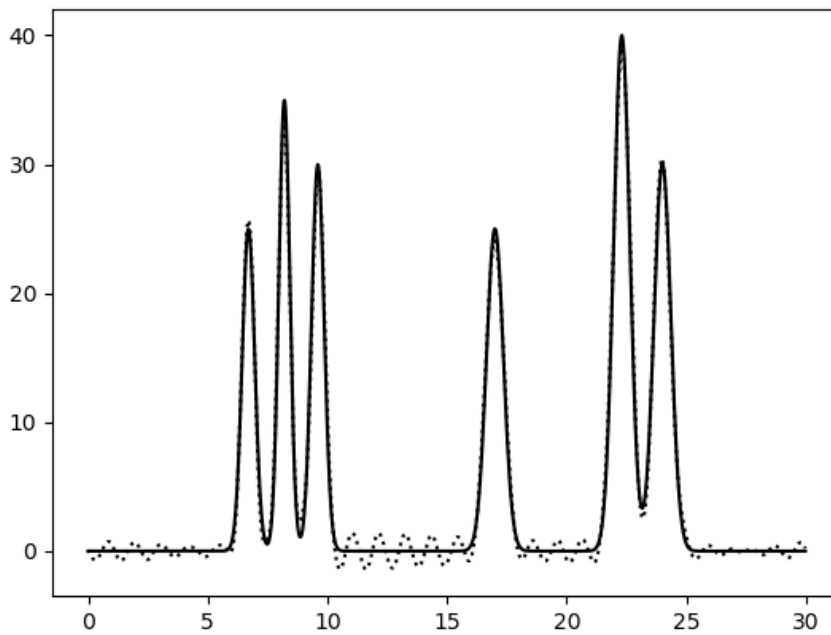


Рис 6б. Восстановление по гармоникам, исключая 26-30 гармоники

0-35,41-50;

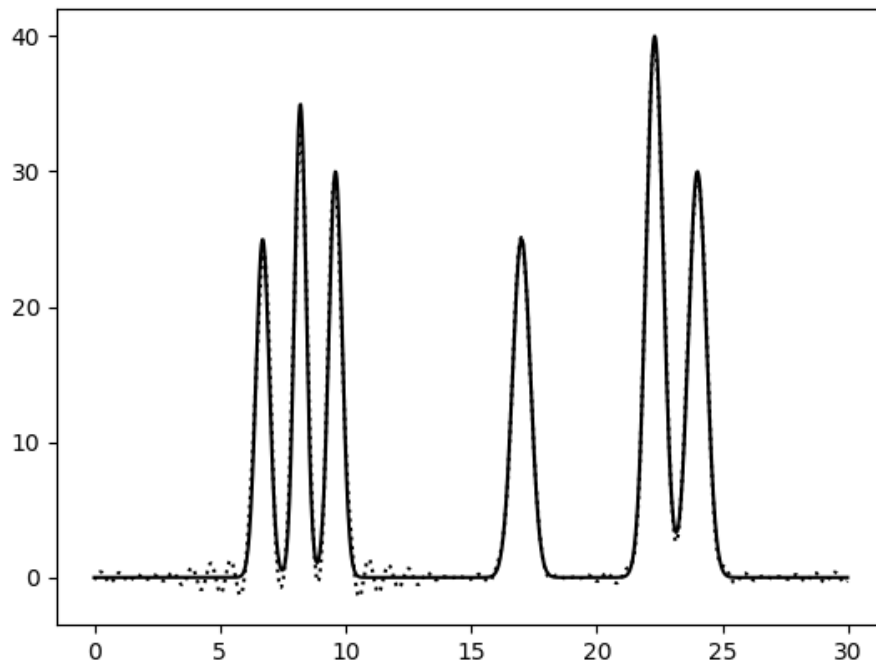


Рис 6в. Восстановление по гармоникам, исключая 36-40 гармоники

Судя по результатам, чем больше номер гармоники, тем меньший вклад она вносит в восстановление функции: при удалении 11-15 гармоник уровень шума довольно высок и меняются высоты пиков, удаление 26-30 гармоник, добавляет незначительный шум, при удалении 36-40 гармоник уровень шума еще меньше. К тому же, это подтверждается тем, что функция без шума восстанавливается по первым 50 гармоникам из 499.

3) Добавление $N+10$ гармоники ($N=50$)

0-50,60;

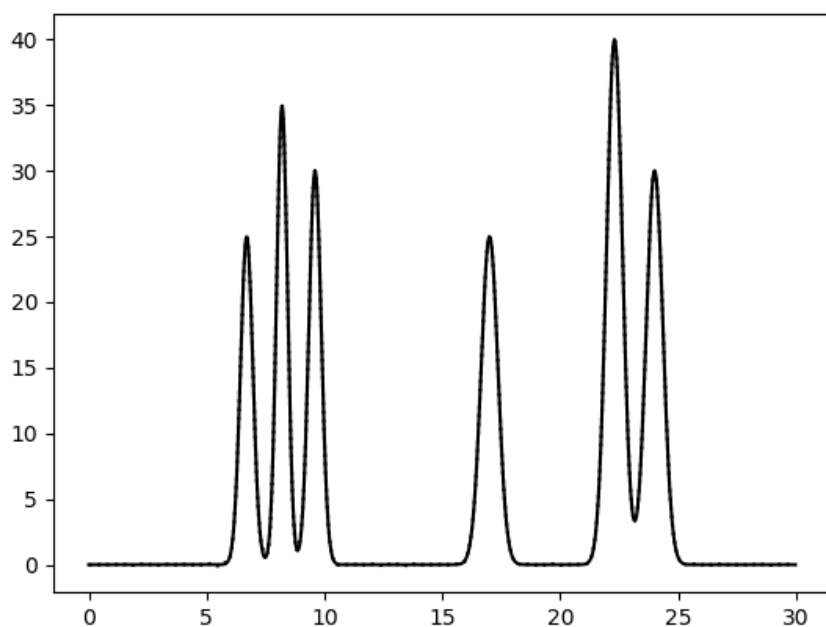


Рис 7. Восстановление по 0-50, 60 гармоникам

Никаких изменений.

3. Оценка качества восстановления

Таблица 1. Восстановление функции по коэффициентам ряда Фурье.

Набор гармоник	Разрешение (Å)	Полнота данных (%)	Шум амплитуды (% от величины F)	Шум фазы (% от величины ϕ)	Качество восстановления
Полный набор гармоник					
0-498	0.6	100%	0	0	Отличное
0-5	5	100%	0	0	Плохое
0-10	2.72	100%	0	0	Среднее
0-15	1.875	100%	0	0	Хорошее
0-20	1.42	100%	0	0	Отличное
0-30	0.96	100%	0	0	Отличное
0-40	0.73	100%	0	0	Отличное
0-50	0.59	100%	0	0	Отличное
0-50	0.59	100%	0	25	Отличное
0-50	0.59	100%	25	0	Отличное
0-50	0.59	100%	25	25	Хорошее
Неполный набор гармоник					
1-50	0.59	98%	0	0	Отличное
2-50	0.59	96%	0	0	Отличное

5-50	0.59	90%	0	0	Хорошее
0-10,16-50	0.59	90%	0	0	Хорошее
0-25,31-50	0.59	90%	0	0	Отличное
0-35,41-50	0.59	90%	0	0	Отличное
0-50,60	0.49	85%	0	0	Отличное