## **Таблица 1. Восстановление функции по коэффициентам ряда Фурье.**

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Набор гармоник | Разрешение  (Å) | Полнота данных  (%) | Шум амплитуды (% от величины F) | Шум фазы  (% от величины phi) | Качество восстановления  (отличное, хорошее, среднее, плохое) | Комментарии |
| Полный набор гармоник | | | | | | |
| 0-30 | 1.00 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное | Идеально совпадает с исходной картинкой, а большие пики разделены даже сильнее. |
| 0-25 | 1.20 Å | 100% | 0 | 0 | Хорошее | Атомы водорода можно отличить от шума, только зная число «атомов». |
| 0-15 | 2.00 Å | 100% | 0 | 0 | Среднее | Атомы водорода уже никак не различить, но атомы углерода всё ещё разделяются, правда слабо. |
| 0-5 | 6.00 Å | 100% | 0 | 0 | Плохое | Различимы группы атомов, но сколько атомов в группе уже не понять. |
| 0-30 | 1.00 Å | 100% | 20 | 0 | Хорошее | Атомы водорода можно отличить от шума, только зная число «атомов». |
| 0-30 | 1.00 Å | 100% | 0 | 20 | Плохое | Атомы водорода неотличимы от шума. |
| 0-30 | 1.00 Å | 100% | 20 | 20 | Плохое | Атомы водорода неотличимы от шума. |
| 0-30 | 1.00 Å | 100% | 10 | 10 | Хорошее | Атомы водорода можно отличить от шума, только зная число «атомов». |
| Неполный набор гармоник | | | | | | |
| 1–30 | 1.00 Å | 96.8% (или 100%, ведь у нулевой гармоники нет длины волны?) | 0 | 0 | Отличное | Идеально совпадает с исходной картинкой, а большие пики разделены даже сильнее. Это исходный график, сдвинутый вниз на константу. |
| 2-30 | 1.00 Å | 93.5% | 0 | 0 | Отличное | Почти как исходный график, только изогнутый по синусоиде. |
| 5-30 | 1.00 Å | 83.8% | 0 | 0 | Хорошее | Шум представлен не мелкими, а большими волнами. Видимо, первые гармоники с большой длиной волны «выравнивают» график. Атомы водорода можно различить, потому что они меньше, чем шум. |
| 0-14, 17-30 | 1.00 Å | 93.5% | 0 | 0 | Среднее | Атомы водорода никак не определить. |
|  | 2.14 Å | 100% |
| 0-30, 40 | 1.00 Å (если бы ещё как-нибудь учесть, что 40ая гармоника портит картинку) | 100% | 0 | 0 | Отличное | Можно различить все атомы, которые есть на исходной картинке, но добавление 40й гармоники немного портит картину так, что можно придумать ещё и лишние атомы |
|  | 0.75 Å | 78% |