

Модель для компьютерного эксперимента: две молекулы $\text{H-C=O}\cdots\text{H-N-C}$ (всего 6 атомов) расположены на расстоянии 3.5 \AA на отрезке $[0, 30]$. Параметры подбирались с примерным соответствием реальным объектам:

`compile-func.py -g 5,3.5,3.1+30,3,4.2+40,3,5.4+5,3.5,8.9+35,3,9.9+30,3,11.3`

Выходной файл скрипта `compile-func.py` - текстовый файл, в котором описана заданная функция. Скрипт также позволяет получить изображение заданной совокупности гауссовых функций:

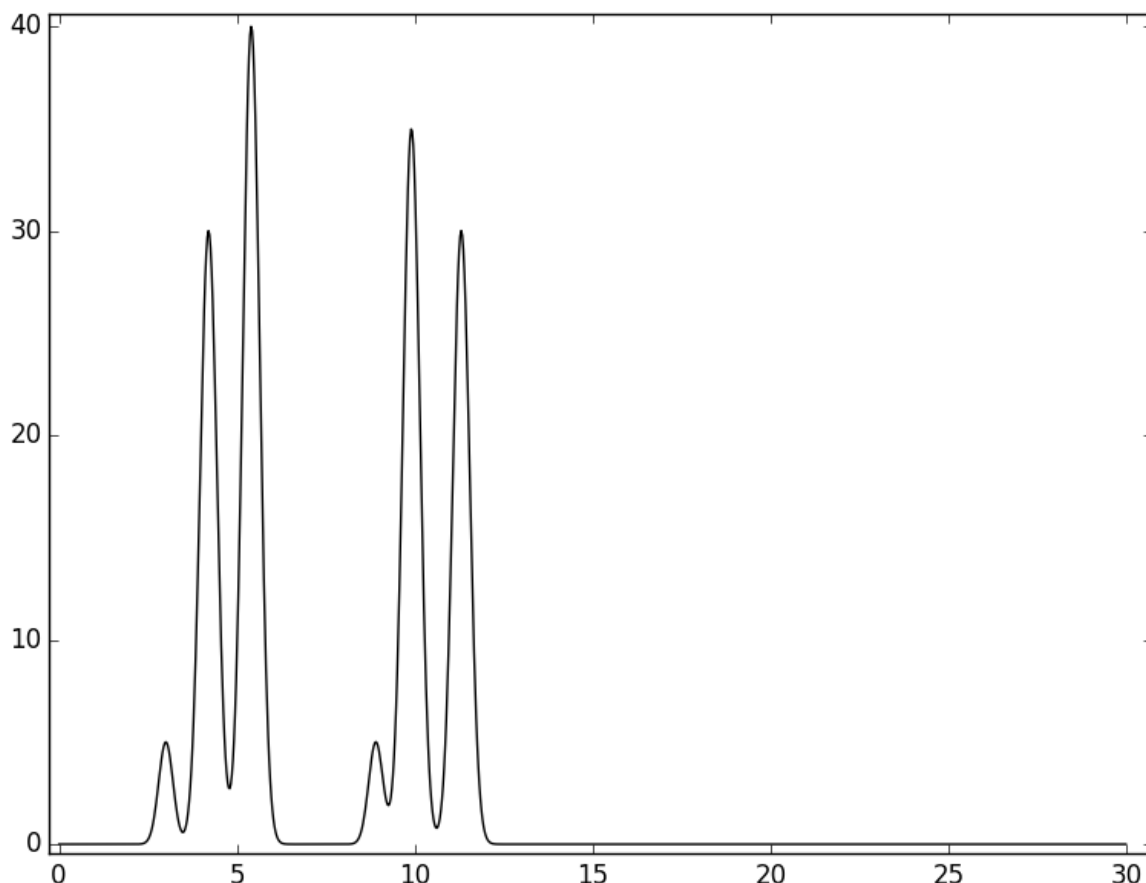


Рис.1. График заданной функции

Коэффициенты разложения функции в ряд Фурье с минимальным уровнем шума были получены с помощью скрипта

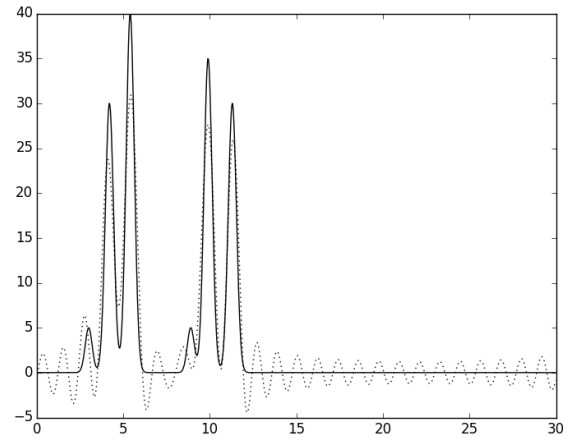
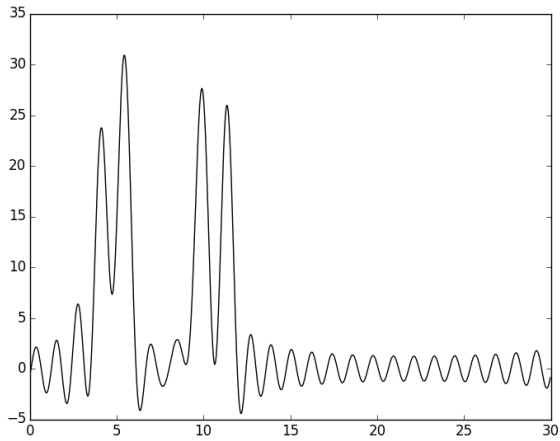
`func2fourier.py -i func.txt`

Выходной файл – текстовый файл с амплитудами и фазами 499 гармоник, а также их номерами.

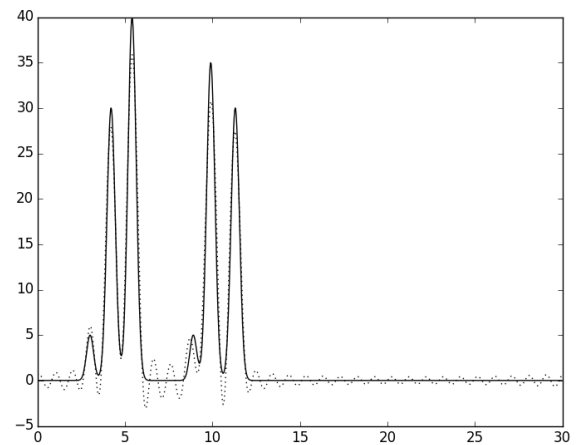
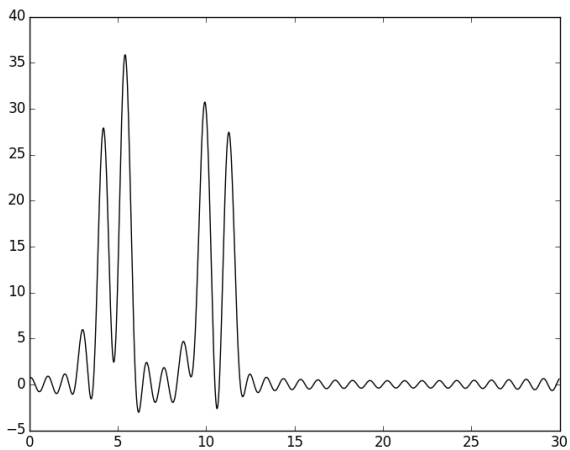
Отбор гармоник и восстановление функций

Из всех имеющихся гармоник отбираются гармоники таким образом, чтобы найти n , для которого по графику восстановленной по полному набору гармоник функции можно было определить положение максимумов всех гауссиан (далее будут идти пары графиков: график полученной из наложенных условий, написанных выше, функции и график-сравнение её с изначально заданной функцией).

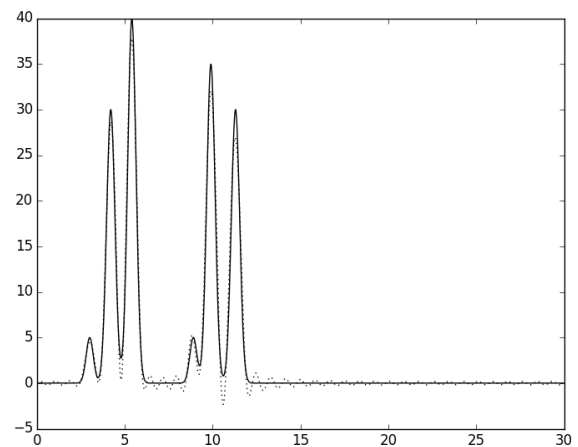
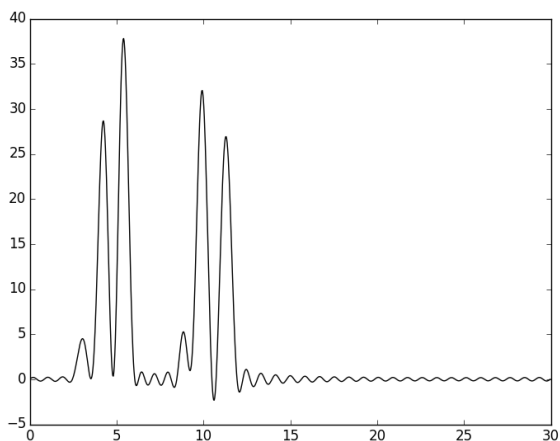
$n=25$: крупные пики заметны, меньшие – сливаются с фоновыми (среднее качество)



$n=30$: можно различить все гармоники, если априори знать их количество (хорошее качество)



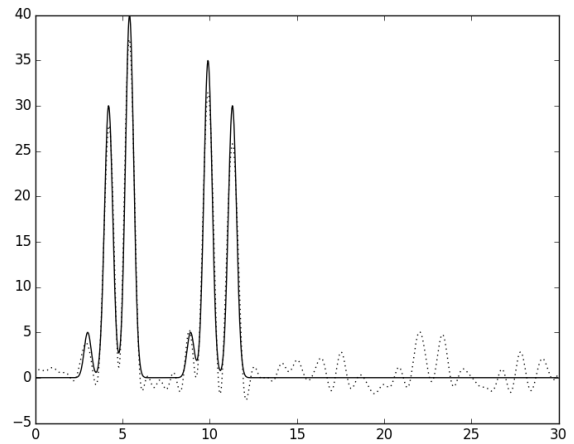
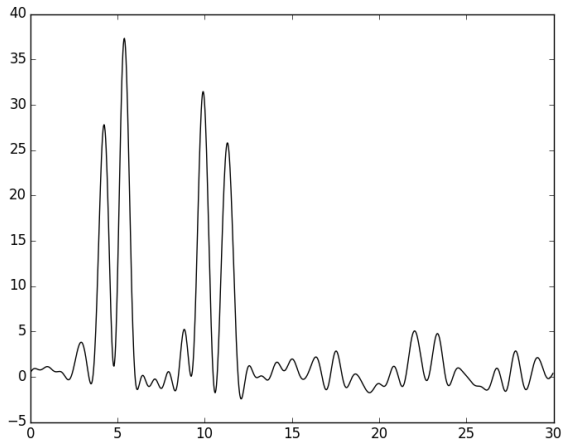
$n=35$: положение всех гауссиан можно однозначно определить без дополнительной информации.



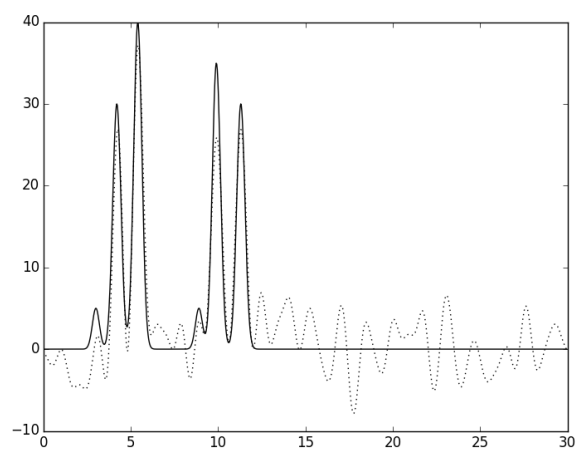
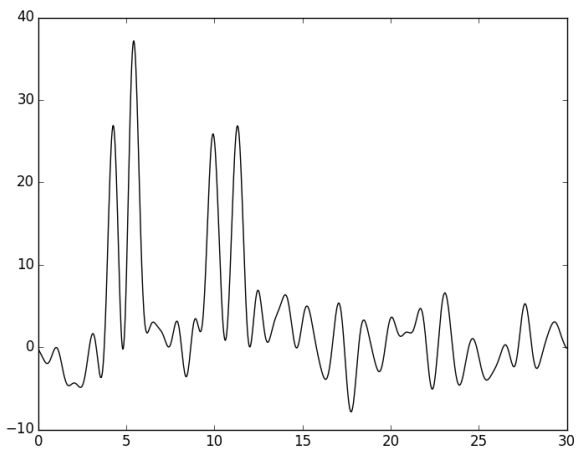
Для дальнейшей работы был использован полный набор гармоник (0,...35)

Добавление шума

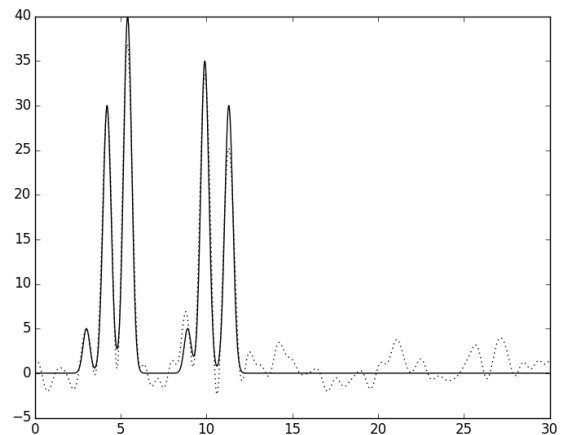
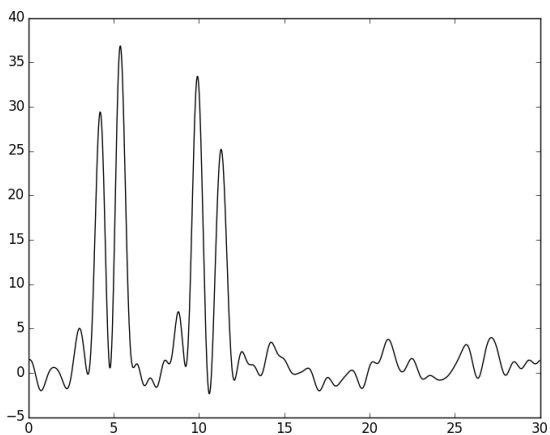
Добавление 20% шума к амплитуде: однозначно определяются только крупные пики, есть «шумы», сопоставимые по амплитуде с меньшими пиками (среднее качество)



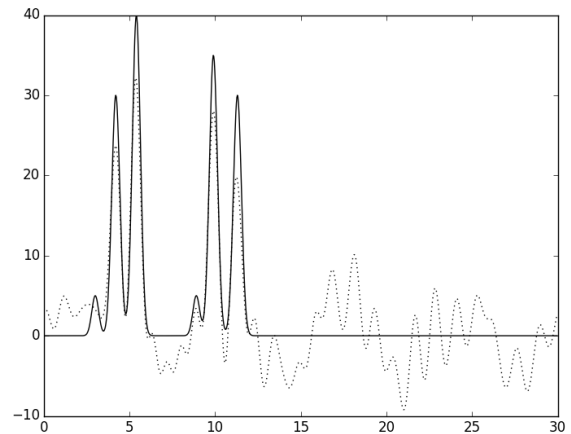
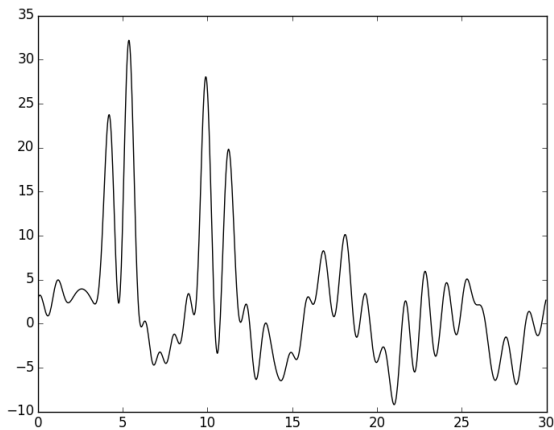
Добавление 20% шума к фазам: по сравнению с предыдущим примером ещё большая амплитуда шума, заметны только крупные пики (среднее качество)



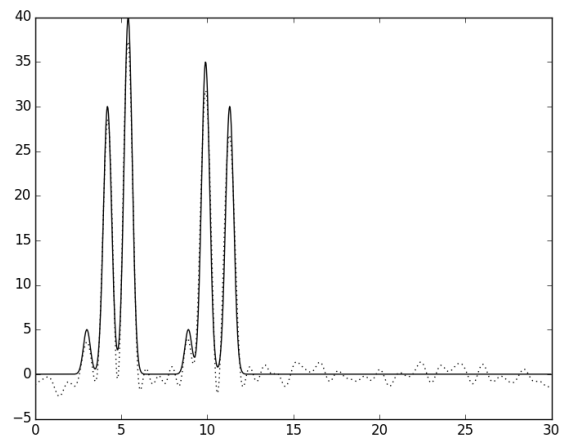
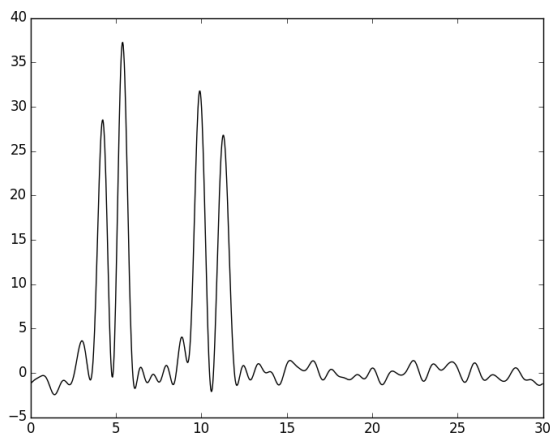
Добавление по 10% шума к амплитуде и фазе: меньшие пики сливаются с шумом (среднее качество)



Добавление по 20% шума к амплитуде и фазе: график сопоставим с примером 20% шума фаз; по-видимому, основной вклад здесь вносят именно фазы, а точнее их шум (среднее качество)

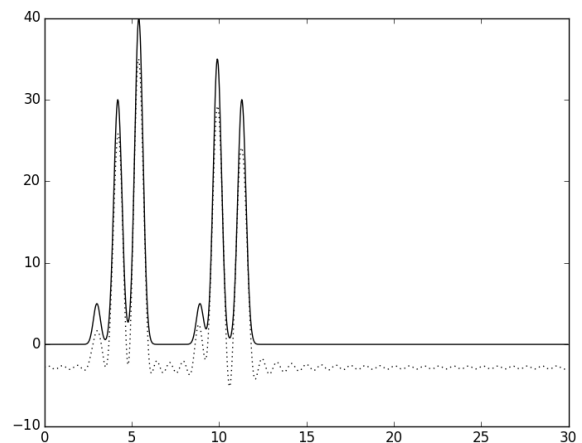
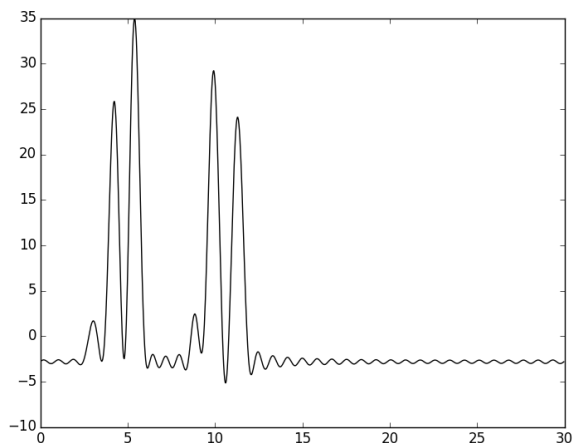


Добавление по 5% шума к амплитуде и фазе: амплитуда шума вдвое меньше меньших пиков, угадываются положения последних (хорошее качество).

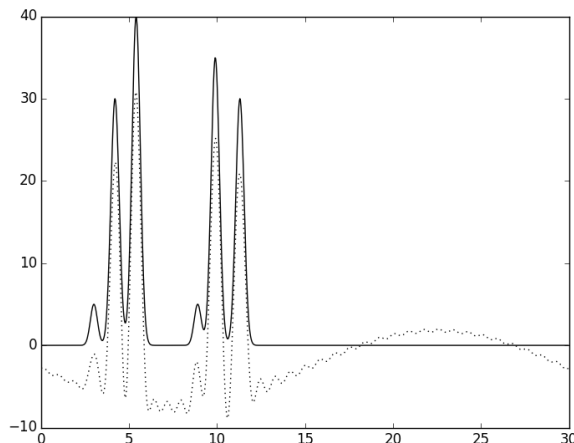
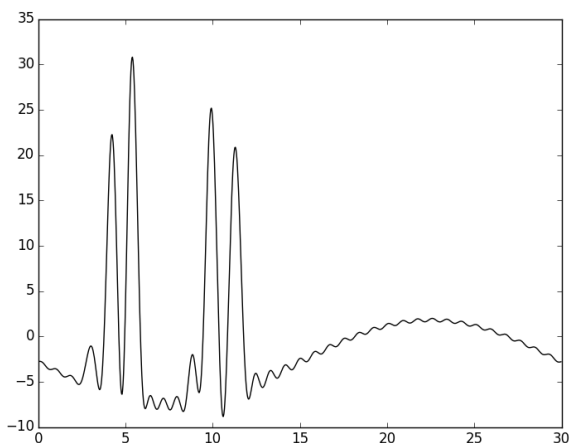


Неполные наборы гармоник

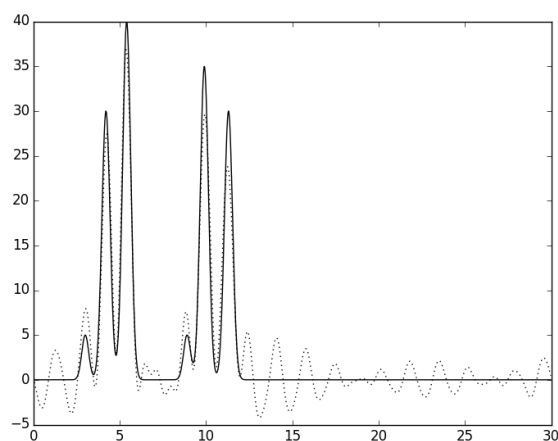
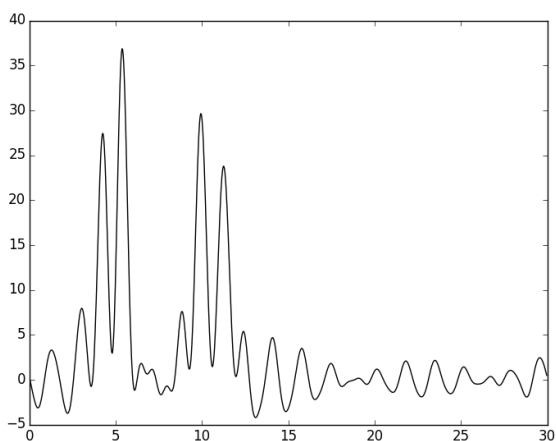
Удаление гармоники с номером 0: график лишь сместился по оси ординат (отличное качество)



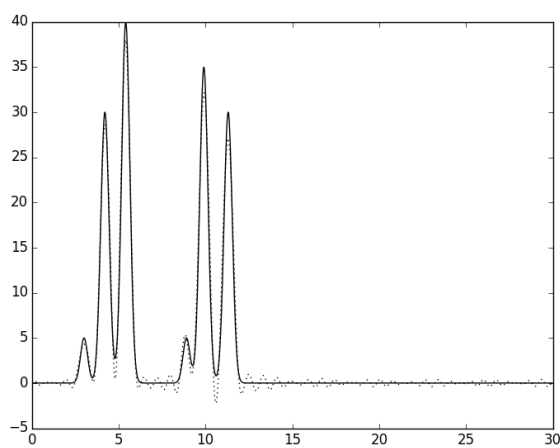
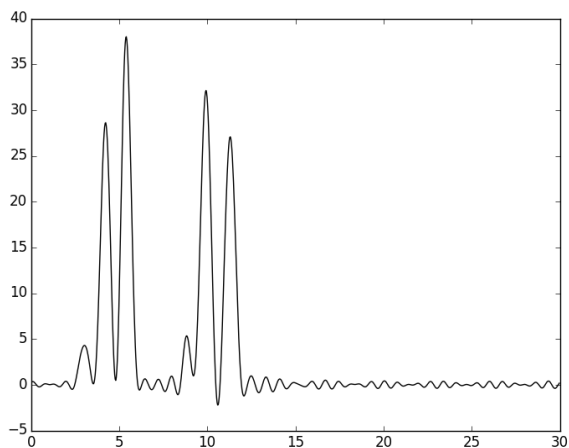
Удаление гармоник с номерами 0 и 1: значения всех максимумов можно однозначно определить (отличное качество)



Удаление гармоник из середины набора (с 16 по 19): угадываются лишь положения больших максимумов (среднее качество).



Добавление гармоники с номером 45 ($n+10$): незначительные изменения в фоновых амплитудах, по сравнению с исходным полным набором (отличное качество).



Определение разрешения и полноты данных

Набор гармоник	Разрешение, Å	Полнота данных, %	Шум амплитуды (% от F)	Шум фазы (% от phi)	Качество восстановления
0-25	30 (Å)/25=1,2	100	0	0	Среднее
0-30	1	100	0	0	Хорошее
0-35	0,86	100	0	0	Отличное
0-35	0,86	100	20	0	Среднее
0-35	0,86	100	0	20	Среднее
0-35	0,86	100	10	10	Среднее
0-35	0,86	100	20	20	Среднее
0-35	0,86	100	5	5	Хорошее
1-35	0,86	97,2	0	0	Отличное
2-35	0,86	94,4	0	0	Отличное
0-15,20-35	0,86	88,9	0	0	Среднее
0-35,45	0,86*	100*	0	0	Отличное

*Поскольку при добавлении дополнительной гармоники график в целом почти не изменился, справедливее указать значения полноты и разрешения, сопоставимые с исходным полным набором гармоник (0-35), нежели с неполным набором (0-45) с разрешением 0,66 Å и полнотой 78,3%.

Выводы

В качество восстановления исходной функции более ощутимый вклад вносят фазы, нежели амплитуды: именно шум в значениях фаз, по сравнению с шумом в значениях амплитуд, вызывает большие отклонения в восстановленной функции (при условии, что шумы одинаковы); однако совершенно необязательно, что при наличии же и того, и другого шума качество восстановления должно быть ниже, чем при восстановлении функции с каждым из шумов по отдельности.

Чем выше номер периода гармоники, тем «грубее» детали, которые он определяет: гармоники низких порядков несут основную информацию о функции, и в случае потери какой-либо из них в восстановленной функции произойдут более существенные изменения (в основном, в амплитуде фоновых колебаний), чем при потере гармоник более высокого порядка, которые несут информацию о более тонких деталях функции. В случае же потери гармоник среднего порядка изменения будут еще драматичнее, поскольку величина периода оных сопоставима с длинами связей между атомами.