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

(числа написаны для примера представления данных; в вашем конкретном случае будут другими)

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 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 |
| 0-1 | 30.00 | 100 | 0 | 0 | плохое | Неразличимы даже молекулы в моделируемой системе |
| 0-5 | 6.00 | 100 | 0 | 0 | плохое |  |
| 0-10 | 3.00 | 100 | 0 | 0 | плохое |  |
| 0-15 | 2.00 | 100 | 0 | 0 | среднее | Можно сделать достаточно точные предположения о положении 1, 2 и 7 атомов. Положения остальных атомов определить практически невозможно |
| 0-20 | 1.50 | 100 | 0 | 0 | среднее | Амплитуда пиков 3, 6 и 8 атомов по величине практически неотличима от шума |
| 0-25 | 1.20 | 100 | 0 | 0 | среднее | Амплитуда пика 3 атома неотличима от шума |
| 0-30 | 1.00 | 100 | 0 | 0 | хорошее |  |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 0 | 0 | отличное | Уровень шума становится практически незначительным - пики атомов имеют заметно большую амплитуду |
| 0-40 | 0.75 | 100 | 0 | 0 | отличное | Дальше можно и не увеличивать n |
| 0-45 | 0.67 | 100 | 0 | 0 | отличное |  |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 10 | 0 | отличное |  |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 20 | 0 | хорошее | Пик 6 атома раздваивается — нельзя однозначно говорить о его положении |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 30 | 0 | среднее | Пик 3 атома имеет амплитуду, сравнимую с шумом |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 40 | 0 | среднее |  |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 50 | 0 | среднее | С достаточной точностью можно определить положение только тех атомов, что имеют большее количество электронов |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 0 | 10 | хорошее | Происходит небольшой сдвиг положения самих пиков |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 0 | 20 | среднее | Мы можем достаточно точно определить положение только 1, 3, 5, 7 атомов |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 0 | 30 | среднее |  |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 0 | 40 | плохое |  |
| 0-35 | 0.86 | 100 | 0 | 50 | плохое |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
| Неполный набор гармоник |
| 1-35 | 0.86 | 97 | 0 | 0 | отличное | В качестве разрешения неполного набора гармоник взяли разрешение гармоники с наибольшим номером |
| 2-35 | 0.86 | 94 | 0 | 0 | отличное | В качестве разрешения неполного набора гармоник взяли разрешение гармоники с наибольшим номером |
| 0-13, 17-35 | 1.43 | 92 | 0 | 0 | среднее | Более-менее достоверно мы можем определить положение только 1, 2, 4, 5, 7 атомов. Качество реконструкции ухудшилось. В качестве разрешения неполного набора гармоник возьмем разрешение 21 гармоники. |
| 0-28, 32-35 | 0.86 | 92 | 0 | 0 | отличное | Могут возникнуть сомнения при определении положения 3 атома (его амплитуда сравнима с шумом). В качестве разрешения неполного набора гармоник возьмем разрешение последней гармоники набора. |
| 0-13,17-35, 45 | 1.43 | 94 | 0 | 0 | среднее | Более-менее достоверно мы можем определить положение только 1, 2, 4, 5, 7 атомов. Добавление гармоники с большим номером не улучшает ситуацию. В качестве разрешения неполного набора гармоник возьмем разрешение 21 гармоники. |
|  |  |  |  |  |  |  |