## **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 | | | | | | |
| 0–5 | 6 Å | 100% | 0 | 0 | Плохое | Можно увидеть, что модель состоит из двух молекул |
| 0–15 | 10 Å | 100% | 0 | 0 | Среднее | Очевидные пики сразу бросаются в глаза, однако те же для водорода – плохо различимы |
| 0–20 | 1.5 Å | 100% | 0 | 0 | Хорошее | Вполне реально угадать положение максимумов, зная модель |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное | Можно определить положение максимумов всех функций |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 20% | 10% | Хорошее | Скорее средне-хорошее |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 30% | 20% | Среднее | С увеличением шума видно, как падает качество восстановления |
| Неполный набор гармоник | | | | | | |
| 2–30 |  | 93% | 0 | 0 | Отличное |  |
| 0–14, 18–30 |  | 90% | 0 | 0 | Хорошее | Все-таки даже среднее |
| 0-30, 40 |  | 78% | 0 | 0 | Отличное |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |  |