

Восстановление электронной плотности

Задание 1. Создание модельной функции электронной плотности в одномерной элементарной ячейке

Модель для компьютерного эксперимента. На отрезке от 0 до 30 Å задается функция, имеющая вид нескольких гауссовых кривых. Эти кривые, представляющие собой пики на графике, соответствующие электронным плотностям атомов. Максимум электронной плотности в центре атома приблизительно пропорционален числу электронов в атоме. Атомы в молекуле связаны ковалентно и находятся на расстоянии 1-1.5 Å друг от друга. Молекулы расположены на расстоянии 3-5 Å (водородная связь или гидрофобное взаимодействие между ними). Всего 6 атомов (3+3). Использовались разные атомы.

Командой:

```
python compile-func.py -g  
5, 3.4, 4.5+15, 3.3, 5.6+5, 3.2, 6.7+5, 3.3, 10.1+27, 3.7, 11.4+35, 3, 12.7
```

была получена функция с параметрами -g, у которой есть 6 слагаемых, каждое из которых описывает атом. Каждое слагаемое состоит из 3-ех чисел: первое - высота пика (число электронов), второе - ширина пика (размер атома) и третье - положение пика на прямой (1D-пространство, в котором происходит генерация ЭП). Функция показана на рисунке 1, все изображения ниже можно кликнуть и открыть в новом окне в большем масштабе.

Текстовый файл, полученный на выходе работы скрипта compile-func.py (пары X & Y): [скачать](#).

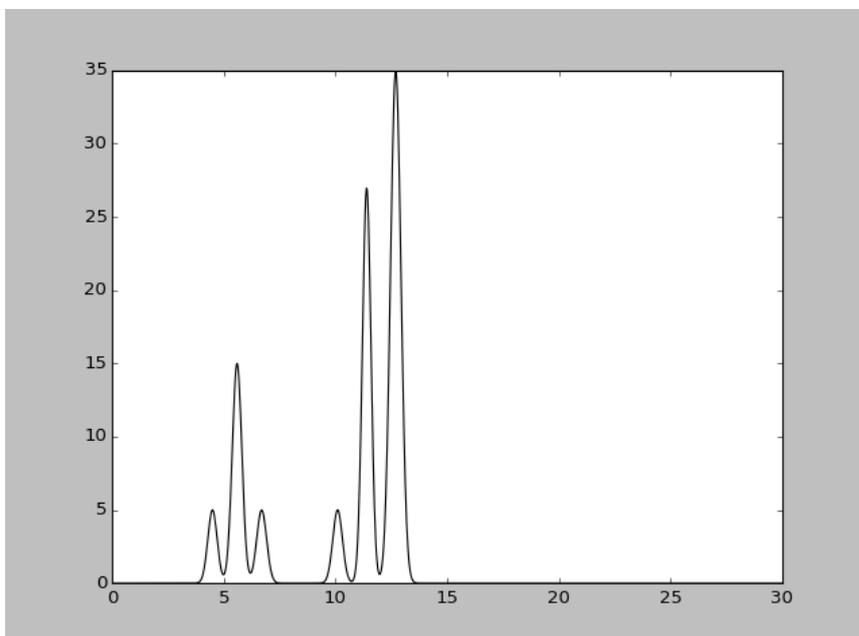


Рисунок 1. Функция, имеющая вид нескольких гауссовых кривых, полученная скриптом compile-func.py

Задание 2. Расчет амплитуд и фаз сигналов, моделирующих экспериментальные данные

Командой

```
python func2fourier.py -i func.txt -o new_function.txt
```

были получены коэффициенты Фурье. В выходном файле: <номер гармоники (всего их 499)>
<амплитуда> <фаза>

Текстовый файл (txt), полученный на выходе работы скрипта func2fourier.py (<номер гармоники>
<амплитуда> <фаза>): [скачать](#).

Задание 3а. Восстановление функции электронной плотности по модельным
("экспериментальным") данным без шума

Из 499 гармоник, то есть, по полному набору, нужно найти n_0 , при котором восстановление
отличное.

Командами

```
python fourier-filter.py -r 0-5 -i new_function.txt -o  
function_0_5.txt  
python fourier2func.py -f func.txt -i function_0_5.txt -o  
function_completed_0_5.txt
```

получены эти функции, представленные на рисунках 2-7 (сплошной черной линией изображена
исходная функция, а пунктиром изображена функция по выбранным гармоникам). Здесь:
new_function.txt - файл, полученный на выходе работы скрипта func2fourier.py; func.txt - файл,
полученный на выходе работы скрипта compile-func.py (пары X & Y).

Значение, при котором видны электронные плотности отдельных атомов, (n_0) = 30.

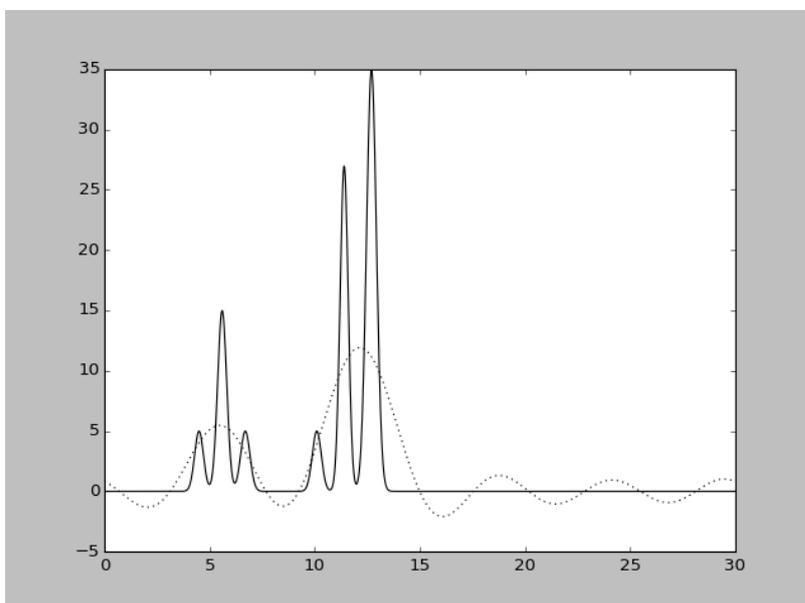


Рисунок 2. Гармоники 0-5

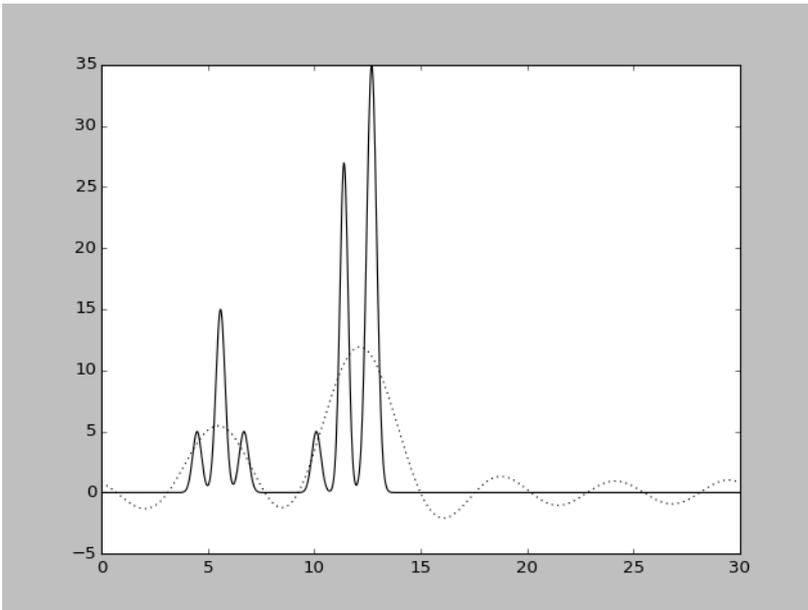


Рисунок 3. Гармоники 0-10

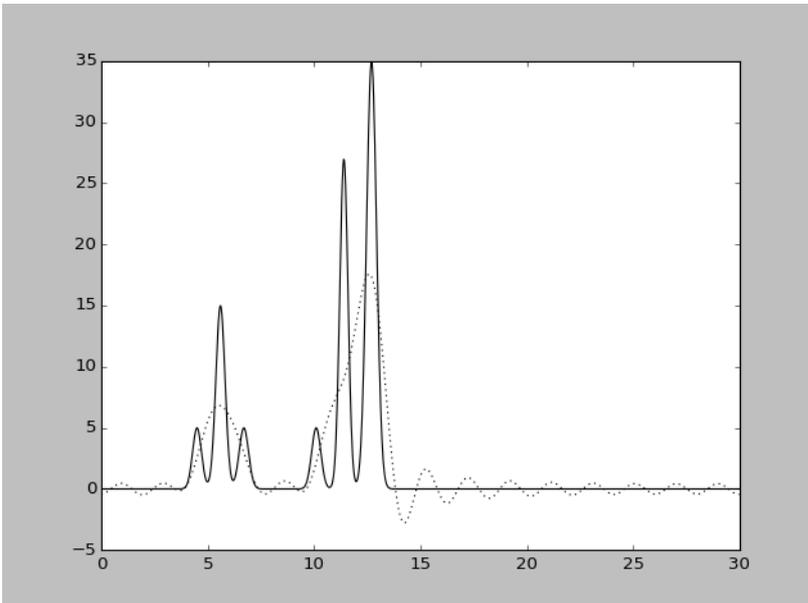


Рисунок 4. Гармоники 0-15

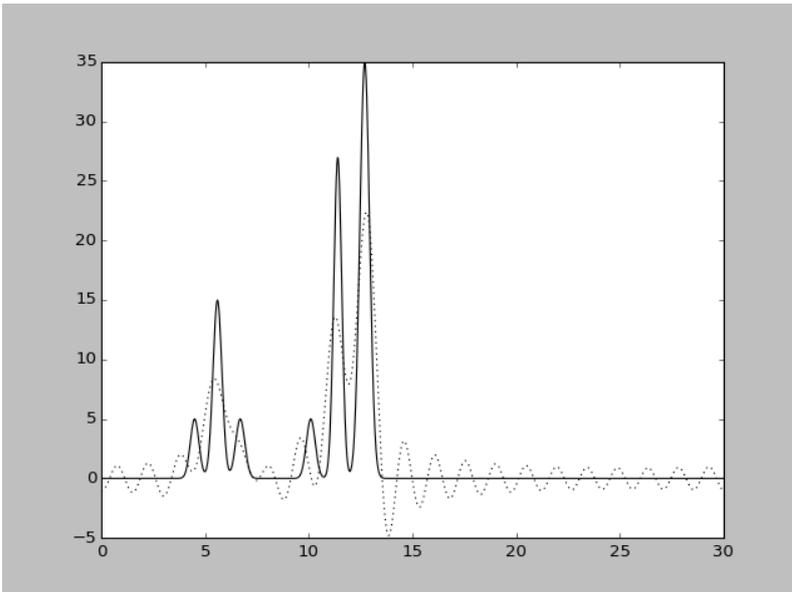


Рисунок 5. Гармоники 0-20

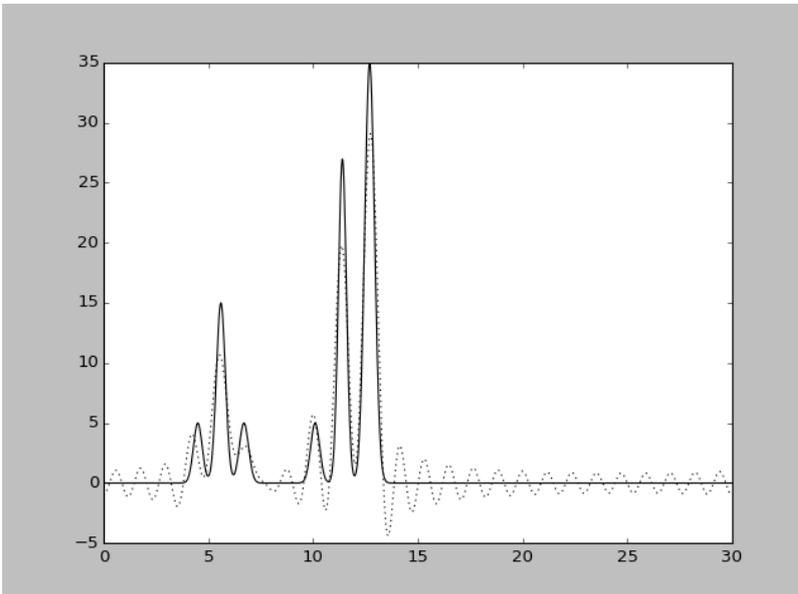


Рисунок 6. Гармоники 0-25

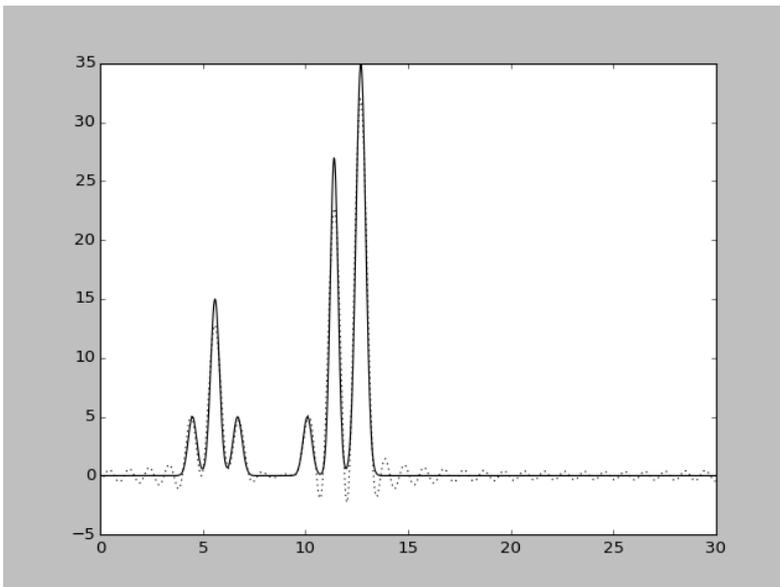


Рисунок 7. Гармоники 0-30

Задание 3б. Восстановление функции электронной плотности по модельным ("экспериментальным") данным с добавлением шума к амплитуде и фазе.

Командами

```
python func2fourier.py -F 20 -i func.txt -o function_with_noise_20.txt
```

```
python fourier-filter.py -r 0-30 -i function_with_noise_20.txt -o
function_with_noise_20_N0.txt
```

```
python fourier2func.py -i function_with_noise_20_N0.txt .txt -o
final_function_with_noise_20_N0.txt
```

получены эти функции с добавлением шума, представленные на рисунках 8-12 (сплошной черной линией изображена исходная функция, а пунктиром изображена функция с добавлением шума по амплитуде, фазе, или по ним вместе).

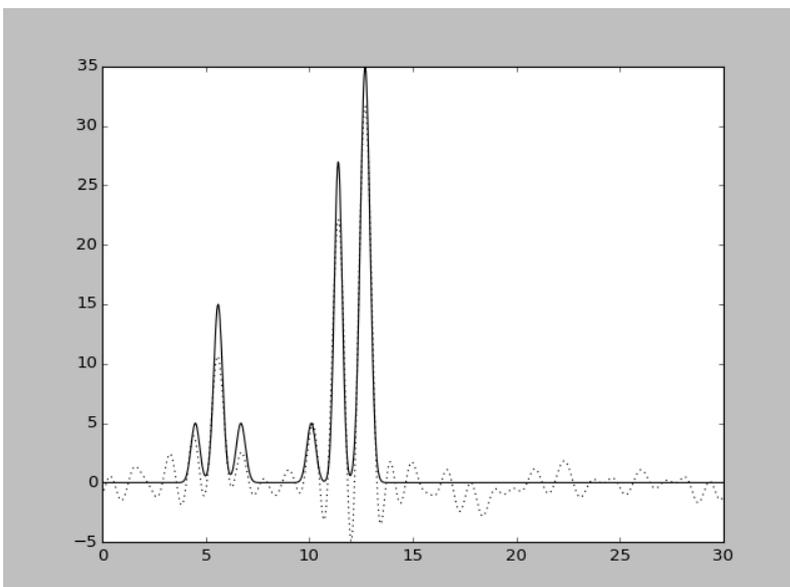


Рисунок 8. Гармоники 0-30, добавлен шум 20% к амплитуде

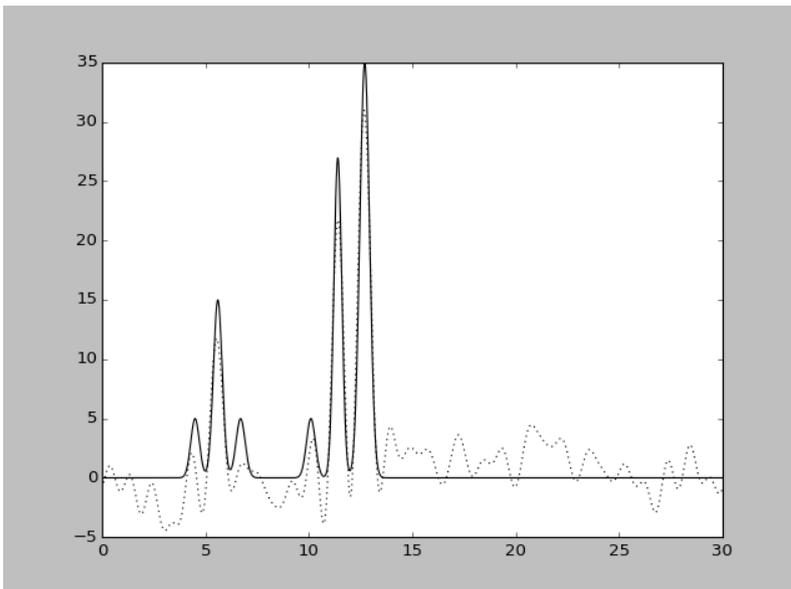


Рисунок 9. Гармоники 0-30, добавлен шум 20% к фазе

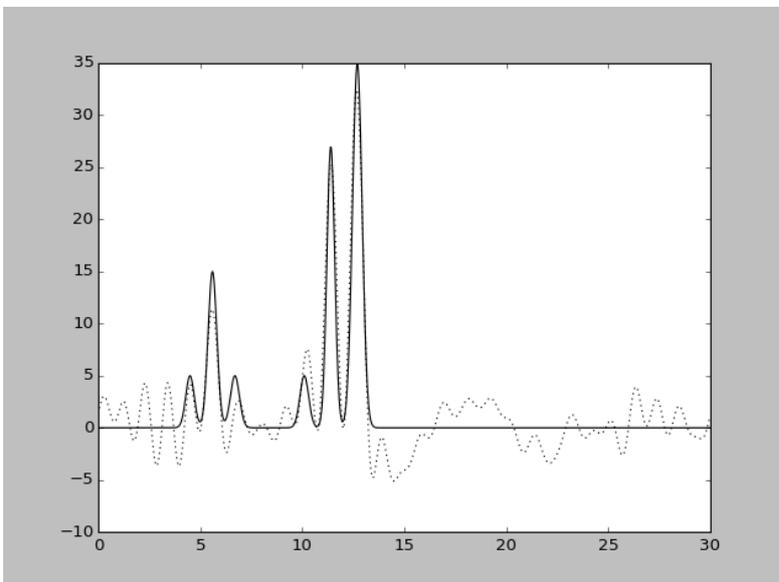


Рисунок 10. Гармоники 0-30, добавлен шум 20% к фазе, и к амплитуде

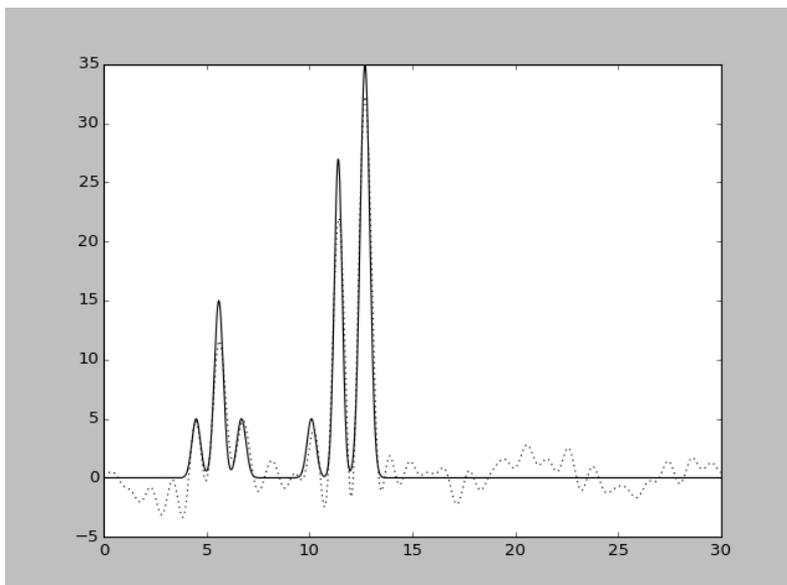


Рисунок 11. Гармоники 0-30, добавлен шум 10% к фазе, и к амплитуде

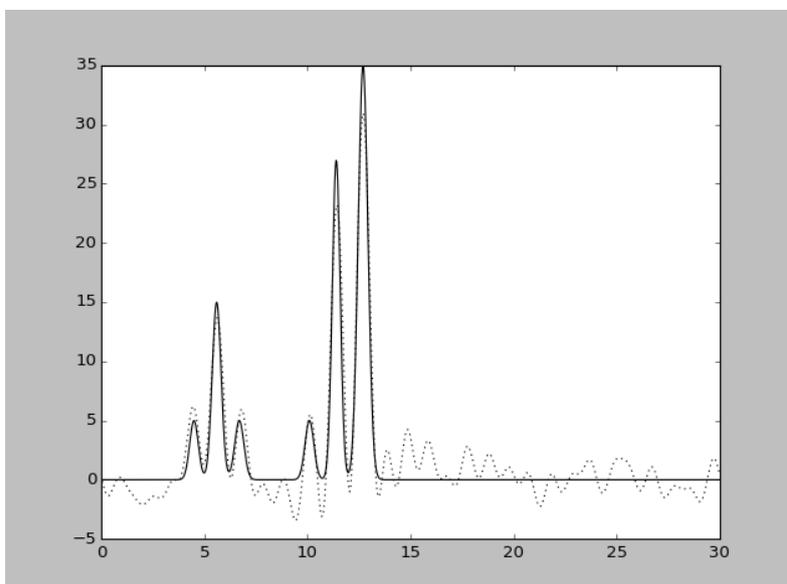


Рисунок 12. Гармоники 0-30, добавлен шум 15% к фазе, и к амплитуде

Задание 3в. Восстановление функции электронной плотности по модельным ("экспериментальным") данным с использованием неполного набора гармоник. На рисунках ниже сплошной черной линией изображена исходная функция, а пунктиром изображена функция по выбранным гармоникам.

Командами

```
python fourier-filter.py -r 1-30 -i new_function.txt -o
function_1_30.txt
python fourier2func.py -f func.txt -i function_1_30.txt -o
function_completed_1_30.txt
```

получена функция, восстановленная по гармоникам 1-30 (то есть, без $n=0$). Результат на рисунке 13, видно, что график просто сдвинут вниз, так как гармоника $n=0$ - константа.

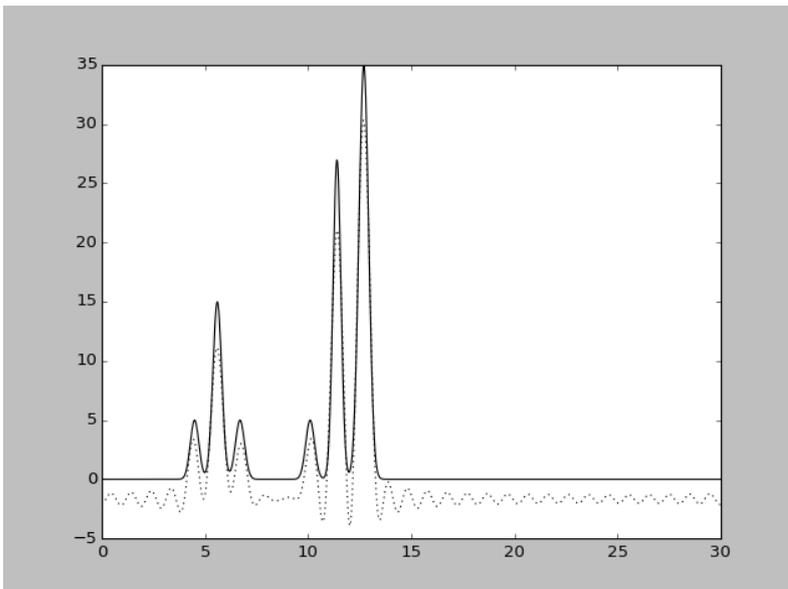


Рисунок 13. Гармоники 1-30 (отсутствует гармоника $n=0$)

На рисунке 14 представлена функция с удаленными из центра гармониками, удалены 10% (3 гармоники - 15,16 и 17)

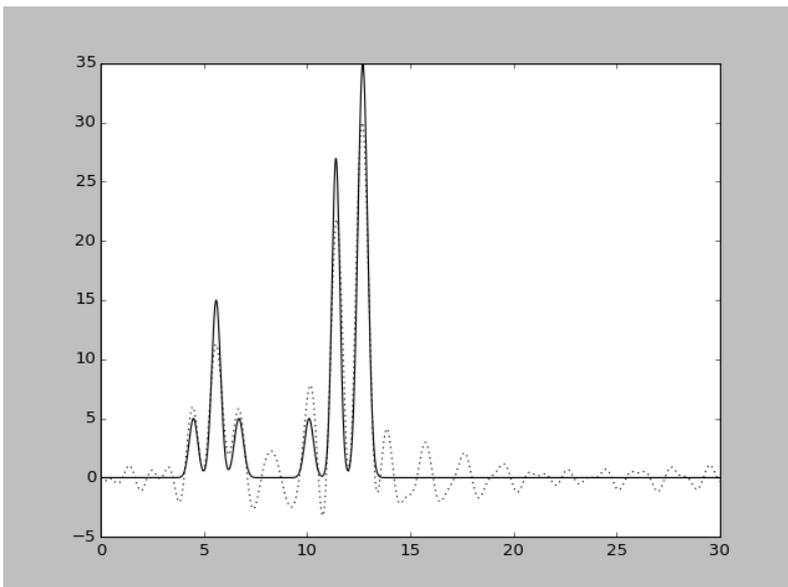


Рисунок 14. Гармоники 0-14 и 18-30 (отсутствуют гармоники 15-17)

И наконец, на рисунке 15 представлена функция с добавлением гармоники $n=40$ (0-30,40).

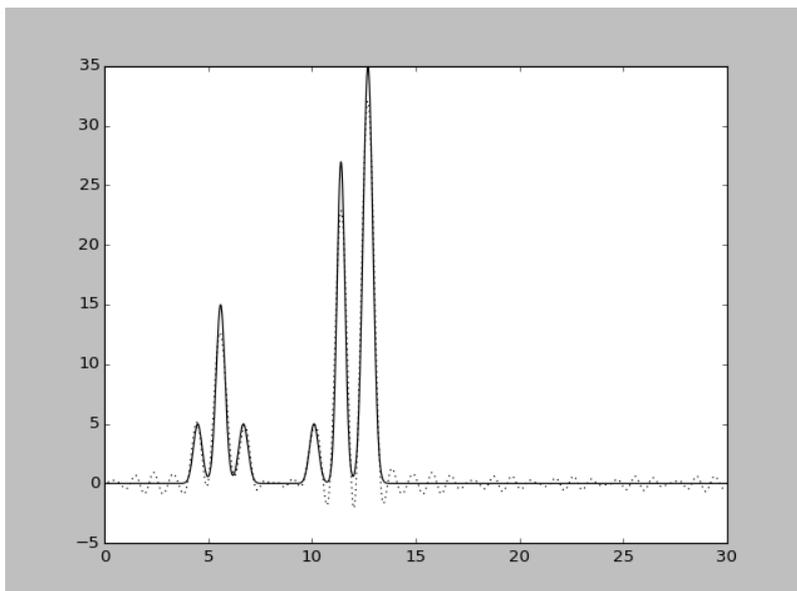


Рисунок 15. Гармоники 0-30 и 40

Вывод:

- 1) Разрешением полного набора гармоник называется период гармоника с номером n , т.е. с наибольшим номером. Период гармоника равен расстоянию между соседними максимумами синусоиды; его также называют длиной волны этой гармоника, хотя никакой физической волны нет. Для полного набора данных (разрешение $d=T/n$) полнота равна 100%.
- 2) Для неполного набора данных нет строгого определения разрешения. Кроме разрешения d необходимо сообщить полноту данных — процент гармоник с длиной волны больше d от максимально возможного, присутствующих в наборе.

В таблице 1 собрана вся информация по проделанной работе.

Таблица 1. Восстановление функции ЭП по коэффициентам Фурье

Набор гармоник	Разрешение Δ	Полнота данных %	Шум амплитуды (% от величины F)	Шум фазы (% от величины Phase)	Качество восстановления
Полный набор гармоник					
0-5	6	100	0	0	Плохое
0-10	3	100	0	0	Плохое
0-15	2	100	0	0	Среднее
0-20	1.5	100	0	0	Среднее
0-25	1.2	100	0	0	Хорошее
0-30	1	100	0	0	Отличное
0-30	1	100	20	0	Хорошее
0-30	1	100	0	20	Среднее
0-30	1	100	20	20	Плохое
0-30	1	100	15	15	Отличное
0-30	1	100	10	10	Отличное
Неполный набор гармоник					
1-30	1.1	97	0	0	Отличное
0-14, 18-30	1.25	90	0	0	Хорошее
0-30,40	1	100	0	0	Отличное