## **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 без шумов | | | | | | |
| 0–1 | 30 Å | 100% | 0 | 0 | Плохое |  |
| 0–10 | 3 Å | 100% | 0 | 0 | Плохое |  |
| 0-20 | 1.5 Å | 100% | 0 | 0 | Среднее |  |
| 0-30 | 1 Å | 100% | 0 | 0 | Хорошее |  |
| 0-40 | 0.75 Å | 100% | 0 | 0 | Хорошее |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное |  |
| Полный набор гармоник с шумами | | | | | | |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 0 | 10 | Отличное |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 0 | 25 | Хорошее |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 10 | 0 | Отличное |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 10 | 10 | Отличное |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 10 | 25 | Хорошее |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 25 | 0 | Отличное |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 25 | 10 | Хорошее |  |
| 0-47 | 0.64 Å | 100% | 25 | 25 | Среднее |  |
| Неполный набор гармоник | | | | | | |
| 1–47 | 0.64 Å | 98% | 0 | 0 | Отличное |  |
| 2-47 | 0.64 Å | 96% | 0 | 0 | Отличное |  |
| 0-22,26-47 | 1.5 Å | 91% | 0 | 0 | Хорошее |  |
| 0-20,28-47 | 2 Å | 83% | 0 | 0 | Среднее |  |
| 0-16,32-47 | 2.7 Å | 66% | 0 | 0 | Среднее |  |
| 0-5,22-27,42-47 | 1.1 Å | 32% | 0 | 0 | Среднее |  |
| 22-27 | 4 Å | 11% | 0 | 0 | Плохое |  |
| 0-47,57 | 0.64 Å | 100% | 0 | 0 | Отличное |  |

Как сравнить восстановленную функцию с исходной

* **Отличное восстановление** – по графику восстановленной функции можно определить положение максимума всех гауссовых слагаемых функции ("атомов")
* **Хорошее восстановление** – можно угадать положение всех максимумов, зная число слагаемых ("атомов"), хотя на восстановленной функции максимумы от атомов не отличимы от шума
* **Среднее восстановление** – положение каких-то атомов определить по восстановленной функции нельзя, других - можно
* **Плохое восстановление** – положение атомов определить не представляется возможным; можно только предсказать примерный размер "молекулы"