– значение i-той вероятности из набора

– связность главного атома i-той вероятности

– связность ближайшего j-того соседа

//---------------------------------------------------------------------------

void TSecondProb::CalcAlg1(double dE0, double dE)

{

int i;

int nKey;

double dProb;

double dMax=-1;

int S, s1, s2,s3; //связность главного атома и его первых соседей

for(i = 0; i < AllNumProbality; i++)

{

nKey = KeyOf((TProbalityEnumirate)i);

//связности соседей

s1 = (nKey>>0)&0xFF;

s2 = (nKey>>8)&0xFF;

s3 = (nKey>>16)&0xFF;

//если сосед неудаляемый то считать его четырёхсвязным

s1 = s1>4?4:s1;

s2 = s2>4?4:s2;

s3 = s3>4?4:s3;

//связность главного атома

S = (s1>0?1:0) + (s2>0?1:0) + (s3>0?1:0);

dProb =0;

dProb+=(S>0?1:0)\*(dE0 - ((4-S) + (4-s1))\*dE);

dProb+=(S>1?1:0)\*(dE0 - ((4-S) + (4-s2))\*dE);

dProb+=(S>2?1:0)\*(dE0 - ((4-S) + (4-s3))\*dE);

dProb = exp(-dProb/((8.617e-5)\*(273+80)));

Probality[i] = dProb;

if(i==0 || dProb > dMax)

dMax = dProb;

}

for(i = 0; i < AllNumProbality; i++)

{

Probality[i] = Probality[i]/dMax;

}

}

//---------------------------------------------------------------------------