

```
1 __author__ = 'Eugene Kolivoshko'
2
3 class Angle(object): #Клас кутів
4     def __init__(self, a): # Функція ініціалізації об'єкта
5         self.__list = [[1, 0], [0, 1], [-1, 0], [0, -1]] # [cos(a), sin(a)]
6         self.__index = 0
7         self.angle = [1, 0]
8         for i in [0, 1, 2, 3]:
9             if a == self.__list[i]:
10                 self.__index = i
11                 self.angle = self.__list[i]
12
13     def prev(self): #поворот на G-
14         if self.__index == 0:
15             self.__index = 3
16         else:
17             self.__index -= 1
18
19         self.angle = self.__list[self.__index]
20
21     def next(self): #поворот на G+
22         if self.__index == 3:
23             self.__index = 0
24         else:
25             self.__index += 1
26
27         self.angle = self.__list[self.__index]
28
29
30 class Section(object): #Клас ланок
31     def __init__(self, n, p, a): # Функція ініціалізації об'єкта
32         self.number = n # Номер ланки
33         self.point = p # Координата
34         self.angle = a # Кут у вигляді [cos(a), sin(a)]
35
36     def __str__(self):
37         return "%d %s %d" % (self.number, self.point, self.angle)
38
39
40 class Chain(object): #Клас ланцюжків
41     def __init__(self, maxLen): # Функція ініціалізації об'єкта
42         self.maxLen = maxLen
43         self.chain = []
44         self.__count = 1
45         self.chain.append(Section(self.__count, [0, 0], [0, 1]))
46         self.__endPoint = [0, 1]
47         self.__thisSection = self.chain[-1]
48         self.allow = True
49         self.__thisPoint = [0, 1]
50         self.length = 1.0
51
52     def genChain(self, style, list=None): # Функція побудови ланцюжка
53         if style == 'random': import random
54         i = 0
55         if style == 'random': rotate = random.randrange(-1, 2) # Випадкового
56         if style == 'range': rotate = 0 # Прямого
57         if style == 'list': rotate = list[i] # За заданим листом ротацій
58
59         while i < self.maxLen - 1: # Власне побудова
60             self.__next(rotate) # Виклик функції побудови ланки
61
62             if self.allow == False:
63                 break
64             i += 1
65
66     def __next(self, rotate): # Функція побудови ланки
67         self.__thisSection = self.chain[-1]
68         angle = Angle(self.__thisSection.angle)
69         nextSection = Section(self.__count, [0, 0], rotate)
70
71         if rotate == -1:
72             angle.prev()
73
74         if rotate == 1:
75             angle.next()
```

```
76
77     nextSection.point[0] = self.__thisSection.point[0] + self.__thisSection.angle[0]
78     nextSection.point[1] = self.__thisSection.point[1] + self.__thisSection.angle[1]
79     nextSection.angle = angle.angle
80
81     if self._test(nextSection): # Виклик перевірки на перетинність
82         self.__count += 1
83         nextSection.number = self.__count
84         self.chain.append(nextSection) # Додавання ланки
85
86 def _test(self, section): # Функція перевірки на перетинність
87     self._getEndPoint(section)
88     i = 0
89     while i < self.__count:
90         if self.chain[i].point == section.point or self.chain[i].point == self._endPoint:
91             self.allow = False
92             return False
93             break
94         i += 1
95     return True
96
97 def _getEndPoint(self, section):
98     self._endPoint[0] = section.point[0] + section.angle[0]
99     self._endPoint[1] = section.point[1] + section.angle[1]
100
101 def getLength(self):
102     import numpy as np
103     self.length = np.sqrt(self.endPoint[0] ** 2 + self.endPoint[1] ** 2)
104
105
106 class ListConfigurations(object): # Клас листа конформацій
107     def __init__(self, length): # Функція ініціалізації об'єкта
108         self.maxChainLength = length
109         self.gapConfigurations = 0
110         self.allowConfigurations = 0
111         self.lengthArr
112         self._genConfigurations()
113
114     def _genConfigurations(self): # Функція побудови і сортування конформацій
115         import itertools
116
117         #Отримати лист всіх можливих ротацій
118         for list in itertools.product(range(-1, 2), repeat=(self.maxChainLength - 1)):
119             chain = Chain(self.maxChainLength) # створення ланцюжка
120             chain.genChain('list', list) # побудова за листом ротацій ланцюжка
121             chain.getLength() # розрахунок довжини
122
123             if chain.allow:
124                 self.allowConfigurations += 1
125                 self.length += chain.length
126             else:
127                 self.gapConfigurations += 1
128
129         #виводимо отримані результати
130         print("Average length: %f" % (float(self.length)/len(self.allowConfigurations)))
131
132 obj2 = ListConfigurations(11)
133 #виводимо отримані результати
134 print(obj2.allowConfigurations, obj2.gapConfigurations)
```