Algorithmes sur entiers

La manipulation d'entiers fait l'objet de nombreuses applications en chimie, du fait que les atomes (et isotopes) comptent des nombres entiers de nucléons (nombre de masse), que les molécules (ou ions, complexes) sont constituées d'atomes individuels (*cf.* formules brutes, indices), que les stœchimétries des réactions impliquent le plus souvent des entiers, que des structures (hélices, cristaux,...) sont caractérisées par des rapports entiers,...

Cette page reprend quelques grands algorithmes classiques sur les nombres entiers, et introduit quelques algorithmes ayant des applications en chimie.

Recherche du PGCD (plus grand commun diviseur)

- http://fr.wikipedia.org/wiki/Algorithme_d%27Euclide (lire les explications géométriques
- http://en.literateprograms.org/Euclidean_algorithm_%28Python%29
- http://stackoverflow.com/questions/11175131/code-for-greatest-common-divisor-in-python
- https://docs.python.org/dev/library/fractions.html#fractions.gcd

Recherche du PPCM

Nombres premiers

Factorisation en nombres premiers

Problème des apéritifs

- http://xkcd.com/287/
- http://paternault.fr/informatique/jouets/aperitif.html et ici

Problème du sac à dos

- http://fr.wikipedia.org/wiki/Probl%C3%A8me_du_sac_%C3%A0_dos

Applications chimiques

- formules CHON
- protéines

- spectro de masse ?

Références diverses

- http://www.mi.fu-berlin.de/wiki/pub/ABI/QuantProtP4/isotope-distribution.pdf
- https://www.biostars.org/p/66772/

From:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/ - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:progappchim:algos_entiers?rev=1428930133

Last update: **2015/04/13 15:02**