Fizički fakultet
Univerziteta u Beogradu

Iris Borjanović

Minimizacija funkcija pomoću Minuita

seminarski rad

Beograd, decembar 2001.

Sadržaj

1 Uvod

Jedan od problema sa kojim se susrećemo u fizici je fitovanje funkcije kroz skup eksperimentalnih tačaka. Jedna od tehnika koja se primenjuje u ovakvim situacijama je **metod najmanjih kvadrata** u kom se minimizuje suma kvadrata odstupanja eksperimentalnih vrednosti od vrednosti višeparametarske funkcije dobijene modelom. Hi-kvadrat se definiše na sledeći način:

$$\chi^2(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(f(x_i, \alpha) - e_i)^2}{\sigma_i^2}$$

gde su e_i i σ_i merene vrednosti i njihove greške, a $f(x_i, \alpha)$ je vrednost modelirane funkcije koja zavisi od parametra α. Minimizacijom hi-kvadrata dobija se procena najboljih vrednosti parametara funkcije.

Minuit je **paket za minimizaciju višeparametarskih funkcija.** Pomoću njega se problem minimizacije hi-kvadrata može numerički rešiti. Tema ovog rada je fitovanje Weizsekerove formule pomoću Minuita. Ceo rad je propraćen uputstvima o upotrebi Minuita. U prvoj glavi se govori o pojmu minimizacije funkcija. U drugoj glavi je opisana Weizsekerova formula. Instalacija Minuita je objašnjena u trećoj glavi. U četvrtoj glavi je opisana struktura fortranskog programa. Tu su takođe nabrojane i opisane naredbe iz Minuita koje se pozivaju u fortranskom programu. U petoj glavi su navedeni parametri iz Weizseckerove formule dobijeni kao rezultat minimizacije. U Dodatku 1. je napisan fortranski program pomoću koga je rađena minimizacija. U Dodatku 2. je primer makefile-a pomoću koga se ovaj fortranski program kompajlira. U Dodatku 3. je fajl iz koga fortranski program čita ulazne podatke, a u Dodatku 4. je fajl u koji fortranski program smešta rezultate minimizacije.

Adresa sajta na kom se mogu naći detaljne informacije o Minuitu je:
wwwinfo.cern.ch/asdoc/minuit/node13.html

2 Minimizacija funkcija

Problem nalaženja ekstremnih vrednosti (minimuma ili maksimuma) funkcije f koja zavisi od jednog ili više parametara, sastoji se u nalaženju vrednosti parametara za koje f ima minimalnu ili maksimalnu vrednost. Nalaženje maksimuma funkcije f svodi se na nalaženje minimuma funkcije $-f$. Ekstremna vrednost funkcije može da bude globalna ili lokalna. Numeričko nalaženje globalnih minimuma je u opštem slučaju vrlo teško. Obično se nalaze lokalni minimumi tako što se polazi od velikog broja različitih vrednosti funkcije za različite vrednosti nezavisno promenjivih. Najmanji od njih se tada proglašava za traženi globalni minimum. Drugi način je da se izađe iz lokalnog minimuma za različite konačne vrednosti Δx. Zatim se proverava da li nas algoritam za nalaženje minimuma uvek vraća u polazni lokalni minimum ili nalazi bolji. Ako nalazi bolji onda se procedura ponavlja izlaženjem iz ovog lokalnog minimuma. U svim slučajevima cilj je pouzdano nalaženje minimumam funkcije na najefikasniji način.

U Minuitu se koriste dva algoritama za minimizaciju funkcija, **MIGRAD** i **SIMPLEX**. MIGRAD je najbolji metod za skoro sve funkcije. On je takozvani "Variable metric method", ali je njegova mana to što zavisi od poznavanja prvih izvoda. SIMPLEX je metod Nelder-a i Mead-a koji ne zavisi od prvih izvoda funkcije, ali je sporiji od MIGRAD metoda.

3 Weizseckerova formula

Problem masa jezgara jedan je od ključnih u nuklearnoj fizici. Masa jezgra masenog broja A i rednog broja Z iznosi

$$m(A,Z) = Zm_p + (A-Z)m_n - B_A,$$

gde je m_p masa protona, m_n masa neutrona, a B_A ukupna interakcija nukleona u jezgru. Masa atoma iznosi:

$$M(A,Z) = m(A,Z) + Zm_e - B_Z,$$

gde je m_e masa elektrona, a B_Z vezivna energija svih elektrona u atomu koja se obično zanemaruje. Ako u izraz za masu atoma zamenimo izraz za masu jezgra i ako broj neutrona obeležimo za N onda je masa atoma:

$$M(N,Z) = Zm_p + Nm_n + Zm_e - B_A$$

uz pretpostavku da je B_Z zanemareno. Vezivna energija nukleona, B_A, se modelira. U modelu tečne kapi "semiempirijska" (Weizsecker-ova) formula za ukupnu energiju veze jezgra glasi:

$$B_A(N,Z) = a_V(N+Z) - a_S(N+Z)^{2/3} - a_C\frac{Z^2}{(N+Z)^{1/3}} - a_A\frac{(N-Z)^2}{N+Z} \pm \frac{a_P}{\sqrt{(N+Z)}}$$

gde je N broj neutrona, Z broj protona, a_V zapreminska energija, a_S površinska energija, a_C Kulonovska energija, a_A energija asimetrije, a a_P energija sparivanja. Poslednji član ima pozitivan predznak ako je i broj protona i broj neutrona paran, ako su oba broja neparna predznak je negativan, a ako su suprotne parnosti poslednji član je nula.

U ovom radu zadatak je bio da se kroz skup eksperimentalnih tačaka profituje Weizsekerova formula. Napisan je fortranski program (Dodatak 1.) u kom se pomoću Minuit paketa hi-kvadrat minimizuje i dobijaju one vrednosti parametara a_V , a_S, a_C, a_A i a_P u Weizsekerovoj formuli za koje je hi-kvadrat minimalan.

4 Instalacija Minuita

Minuit se distribuira kao paket biblioteka za Fortran 77 koje su sastavni deo **CERN-ovskih biblioteka**. Adresa sajta sa kog se mogu skinuti CERN-ovske biblioteke za linux je: hepwww.ph.qmw.ac.uk/HEPpc/hepsw.html . Pored pristupa bibliotekama potrebno je napisati:

- fortranski program u okviru kog se pozivaju naredbe iz Minuita (videti Dodatak 1.).
- makefile pomoću kog se fortranski program kompajlira (videti Dodatak 2.)
- ulazni fajl iz kog fortranski program čita podatke.(videti Dodatak 3.)

Posle kompajliranja i izvršavanja fortranskog programa rezulatati minimizacije se smeštaju u izlazni fajl (videti Dodatak 4.)

5 Struktura fortranskog programa

Fortranski program se sastoji od glavnog programa i 3 potprograma (**FCN, FUTIL, INTRAC**) (videti Dodatak 1.). U glavnom programu definišu se parametri i pozivaju naredbe iz Minuita. Struktura glavnog programa se bitno ne menja (osim parametara) bez obzira na problem koji korisnik rešava. U potprogramu FCN korisnik definiše višeparametarsku funkciju koja se minimizuje. Ovoj funkciji se daje naziv FCN. Minuit posle minimizacije daje one vrednosti parametara za koje ova funkcija ima minimum. Potprogram FUTIL je potprogram koji FCN potprogram poziva (nije obavezan). INTRAC (logička funkcija) je deo CERN-ovskih biblioteka i ona se obavezno poziva u programu.

Ovo su naredbe iz Minuita koje se pozivaju u glavnom programu:

- **CALL FCN (NPAR, GRAD, FVAL, XVAL, IFLAG, FUTIL)** je potprogram koji računa vrednost FCN funkcije.

NPAR je broj parametara;
XVAL je vektor parametara;
IFLAG ukazuje na to šta treba da se izracuna: za IFLAG=1 učitavaju se ulazni podaci, za IFLAG=2 računaju se prvi izvodi (ovo je opciono); posle IFLAG=1,2 računa se vrednost funkcije, FVAL, koja je najčešće hi-kvadrat; IFLAG=3 dolazi posle fita i tu se rade finalna izračunavanja i prikazuju rezultati fita;
FUTIL je ime rutine koju FCN poziva (opciono);
FVAL je izračunata vrednost funkcije;
GRAD je vektor prvih izvoda.

- **CALL MNINIT (IRW,IRD,ISAV)** inicijalizuje Minuit.
  IRW je broj fajla iz kog Minuit čita podatke;
  IRD je broj fajla u koji se smeštaju podaci iz Minuita;
  ISAV je broj fajla za upotrebu SAVE komande.

- **CALL MNSETI (TITLE)** daje naslov problemu.
  TITLE je string od maksimalno 50 karaktera koji sadrži ime fita.

- **CALL MNPARM (NPRM,PNAM,VSTRT,STP,PMIN,PMAX,IER)** definiše parametre funkcije. NPRM je broj parametra;
  PNAM je string od maksimalno 10 karaktera koji predstavlja naziv parametra;
  VSTART je početna vrednost parametra;
  PMIN i PMAX su minimalna i maksimalna vrednost parametra;
  IER je error return code (on je 0 ako nema greški).

- **CALL MNEXCM (FCN,CHCOM,ARGLIS,NARG,IER,FUTIL)** izvršava komande iz Minuita.
  FCN je ime funkcije koja se analizira;
  CHCOM je string sa imenom komande koja se izvršava;
  ARGLIS je numerički argument komande;
  NARG je broj argumenata;
  FUTIL je ime funkcije koju FCN poziva (0 ako se nepoziva);
  IER je error return code (on je 0 ako se komanda normalno izvršava, inače je > 0).

Ovo su komande iz Minuita koje se pozivaju sa CALL MNEXCM

- **SET STRATEGY (level)** odredjuje strategiju kojom se računaju prvi i drugi izvodi pri odredjenoj tehnici minimizacije. Veći (level) podrazumeva veću pouzdanost, a dozvoljene vrednosti su 0, 1 (default) i 2.

- **SET PRINTOUT (level)** reguliše output Minuita: (level)= -1 nema outputa sem za SHOW PRINT komandu, (level)=0 je minimalni output, (level)=1 je normalni output (default), (level)=2 dodatni output koji daje intermedijalne rezultate, (level)=3 maksimalni output.

- **MIGRAD** je tehnika minimizacije.

- **SIMPLEX** je tehnika minimizacije

- **MINOS** je program koji radi pouzdanu analizu grešaka parametara. On uzima u obzir i korelacije između parametara i nelinearnosti. On se poziva posle MIGRAD komande jer je za njegov rad neophodno da je minimum izračunat.
  .

6 Rezultati minimizacije

I sa SIMPLEX i sa MIGRAD metodom minimizacije dobijaju se iste vrednosti parametara. Takođe vrednost parametara dobijenih minimizacijim ne zavisi od početnih vrednosti parametara i od koraka sa kojim se njihova vrednost menja što govori o tome da se radi o globalnom minimumu. Dobijene vrednosti parametara su:

$$a_V = 14.792(4)\ MeV$$

$$a_S = 15.257(9)\ MeV$$

$$a_C = 0.6305(5)\ MeV$$

$$a_A = 20.77(2)\ MeV$$

$$a_P = 11.90(3)\ MeV$$

Vrednost hi-kvadrata $\chi^2 = 75012$ (za 928 merenja vezivne energije) je velika jer su greške merenja vezivne energije mnogo manje od razlike merene i fitovane vrednosti vezivne energije (Weizsekerova formula samo približno dobro opisuje vezivnu energiju nukleona).

7 Dodatak 1

PROGRAM WEIZSECKERFIT
c$*******$DOUBLE PRECISION VERSION$********$

c Ovaj fortranski program fituje Weizseckerova formula za vezivnu
c energiju nukleona tako što se pomoću Minuit paketa za minimizaciju
c funkcija minimizuje hi-kvadrat i nalaze one
c vrednosti parametara za koje je hi-kvadrat minimalan.

c Minuit instaliran na IBM i Unix stanicama je DOUBLE PRECISION version.
c Varijable koje pocinju slovima od A do H i od O do Z su double
c precision, a ostale (I,J,K,L,M,N) su celobrojne.

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)

c FCN i FUTIL potprogrami moraju biti definisani kao eksterni u glavnom
c programu.

EXTERNAL FCN,FUTIL

DIMENSION NPRM(5),VSTRT(5),STP(5),PMIN(5),PMAX(5)
CHARACTER TON*5
CHARACTER*10 PNAM(5), chnam

c Unosi se broj parametara koji figuriše u funkciji. U Weizsekerovoj
c formuli broj parametara je pet.
DATA NPRM / 1 , 2 , 3 , 4 , 5 /
c Unose se nazivi parametara.
DATA PNAM $/'a'_v,'a'_s,'a'_c,'a'_a,'a'_p$ **/**
c Unose se početne vrednosti parametara.
DATA VSTRT/ 1.0 , 1.0 , 0.1 , 1.0 , 1.0 /
c Unosi se korak za koji se menja vrednost parametara.
DATA STP / 1.0 , 1.0 , 0.1 , 1.0 , 1.0 /
c Unosi se minimalna i maksimalna vrednost parametra. Ako se stavi nula
c i za minimum i za maksimum znači da nema ograničenja na vrednost
c parametra.
DATA PMIN / 0.0 , 0.0 , 0.0 , 0.0 , 0.0 /
DATA PMAX / 0.0 , 0.0 , 0.0 , 0.0 , 0.0 /

DATA ZERO,ONE,TWO,THREE,TEN / 0., 1., 2., 3.,10. /
c$---$

c Otvara se fajl iz kog se čitaju podaci (w.dat)
OPEN(UNIT=25,FILE='w.dat',STATUSs='old')

c Otvara se fajl u koji se smeštaju podaci (w.out)
OPEN (UNIT=26,FILE='wproba.out',STATUS='unknown',FORM='FORMATTED'
c– –

c Naredbom, CALL MNINIT(IRW,IRD,ISAV), se inicijalizuje Minuit.
c Prvi broj, IRW, je broj fajla iz kog Minuit čita podatke,
c drugi broj, IRD, je broj fajla u koji se smeštaju podaci iz Minuita,
c treći broj, ISAV je broj fajla za upotrebu SAVE komande.

CALL MNINIT(25,26,7)
c– –

c∗ ∗ ∗ ∗ ∗ ∗ ∗LOOOP OVER EXPERIMENTAL SAMPLES∗ ∗ ∗
DO 100 IC=2,2
PRINT *,' *************** S A M P L E NO. ',IC**
c– –

c Naredbom CALL MNPARM(NPRM,PNAM,VSTRT,STP,PMIN,PMAX,IER) se definišu
c parametri funkcije. NPRM je broj parametra, PNAM je string od maksimalno
c 10 karaktera koji predstavlja naziv parametra, VSTART je početna
c vrednost parametra, PMIN i PMAX su minimalna i maksimalna vrednost parametra,
c IER je error return code (0 ako nema greški)

```
      DO 11 I= 1, 5
      CALL MNPARM(NPRM(I),PNAM(I),VSTRT(I),STP(I),PMIN(I),PMAX(I),IER)
      IF (IER .NE. 0) THEN
      WRITE (26,'(A,I3)') ' UNABLE TO DEFINE PARAMETER NO.',I
      STOP
      ENDIF
 11   CONTINUE
      PRINT *,'mn, after mnparm'
```

c Naredbom CALL MNSETI(TITLE) se daje ime problemu kojim se bavimo
c gde je TITLE string od maksimalno 50 karaktera koji sadrži ime fita.

CALL MNSETI('WEIZSECKEROVA FORMULA')

c Naredba CALL MNEXCM(FCN,CHCOM,ARGLIS,NARG,IER,FUTIL) izvršava komande
c iz Minuita. FCN je ime funkcije koja se analizira (hi-kvadrat), CHCOM
c je string sa imenom komande koja se izvršava, ARGLIS je numerički argument
c komande, NARG je broj argumenata, FUTIL ime funkcije koju FCN poziva (0

c ako se nepoziva), IER je error return code (0 ako se komanda normalno
c izvršava inače je > 0).

c CALL MNEXCM prvo poziva komandu SET STRATEGY (level) kojom se odredjuje strategija
c kojom se računaju prvi i drugi izvodi pri određenoj tehnici minimizacije.
c Veći level podrazumeva veću pouzdanost. Dozvoljene vrednosti su 0,
c 1 (default) i 2. U ovom primeru je rađeno sa 2.

CALL MNEXCM(FCN, 'SET STR', TWO ,1,IERFLG, 0)

c Izvršava se komanda CALL FCN (NPAR, GRAD, FVAL, XVAL, IFLAG, FUTIL)
c NPAR je broj parametara, XVAL je vektor parametara, IFLAG ukazuje
c šta treba da se izračuna, FUTIL je ime potprograma koji FCN poziva
c ako ima potrebe, FVAL je
c izračunata vrednost funkcije, GRAD je vektor prvih izvoda.
c FCN je potprogram koji piše korisnik i treba da daje vrednost funkcije
c (hi-kvadrata) koja se minimizuje (detaljniji opis u potprogramu).
c Ovde se poziva FCN funkcija sa vrednošcu IFLAG=1, koja učitava ulazne
c podatke.

CALL MNEXCM(FCN, 'CALL FCN', ONE ,1,IERFLG, 0)
PRINT *,'mn, after – call fcn 1'

c CALL MNEXCM poziva komandu SET PRINTOUT (level) kojom se reguliše output Minuita.
c Ako je (level)=−1 nema outputa sem za SHOW PRINT komandu, (level)=0 je minimalni
c output, (level)=1 je normalni output (default), (level)=2 dodatni output
c koji daje intermedijalne rezultate, (level)=3 maksimalni output. Ovaj
c program je rađen sa (level)=0.

CALL MNEXCM(FCN,'SET PRINT', ZERO ,1,IERFLG,0)
PRINT *,'mn, after – set print'

c Izvršava se komanda CALL FCN sa vrednošcu IFLAG=3. Ona
c smešta rezultate u izlazne fajlove.

CALL MNEXCM(FCN,'CALL FCN', THREE , 1,IERFLG,0)
PRINT *,'mn, after – call fcn 3 ; next is migrad'

c Radi se minimizacija funkcije (hi-kvadrata) 'MIGRAD' metodom.

CALL MNEXCM(FCN,'migrad', ZERO ,0,IERFLG,0)
PRINT *,'mn, after – migrad ; next is minos'

c MINOS radi pouzdanu analizu grešaka parametara i poziva
c se tek pošto je izračunat minimum tj. posle MIGRAD komande.

```
      CALL MNEXCM(FCN,'MINOS', TEN ,0,IERFLG,0)
      PRINT *,'mn, after – minos'
```

c izvršava se komanda CALL FCN sa vrednoscu IFLAG=3. Ona smešta
c rezultate u izlazne fajlove.

```
      CALL MNEXCM(FCN,'CALL FCN', THREE , 1,IERFLG,0)
      PRINT *,'mn, after – call fcn 3'

  100 CONTINUE
```

c Zatvaraju se ulazni i izlazni fajlovi.

```
      CLOSE(26)
      CLOSE(25)
```

c Kraj programa.

```
      STOP
      END
```

c– –

c Potprogram koji računa FCN funkciju koja se minimizuje (hi-kvadrat).

```
      SUBROUTINE FCN(NPAR,GIN,F,par,ifLAG,FUTIL)
```

C* * * * * * * * * ** DOUBLE PRECISION VERSION * * * * * * * * * * * **

```
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)

      COMMON/COMF/a(5)/sum/sum
      REAL m,Nz,Nn
      DIMENSION par(*),gin(*),ber(4000)
      DIMENSION Nz(4000),Nn(4000),rn(4000),rz(4000),ra(4000)
      DIMENSION m(4000),b(4000)
      EXTERNAL FUTIL
```

c Naredba SAVE se upotrebljava da bi se lokalne varijable iz
c potprograma memorisale

```
      SAVE NSTEP
      SAVE Nn,Nz,rn,rz,ra,m,b,ber
```

```
      DATA ic/0/
      ic=ic+1
      a(1)=PAR(1)
      a(2)=PAR(2)
      a(3)=PAR(3)
      a(4)=PAR(4)
      a(5)=PAR(5)
c-----------------------------------------------------------

c U glavnom programu se prvo poziva FCN sa vrednošcu IFLAG=1
c i tada se izvršava ovaj deo potprograma u kom se učitavaju podaci
c iz ulaznog fajla. Ako je IFLAG > 1 ovaj deo se preskače i ide se
c na liniju 100.

      IF(IFLAG.NE.1) GO TO 100

c U prvom redu ulaznog fajla je broj redova (nstep) sa ulaznim podacima
c a u ostalim redovima su po kolonama smešteni broj neutrona Nn,
c broj protona Nz, rn, rz, ra, atomska masa m i vezivna energija b
c u MeV-ima.

      READ (25,*) NSTEP
      PRINT *,' NSTEP=',NSTEP
      DO I=1,NSTEP
      READ (25,*) Nn(i),Nz(i),rn(i),rz(i),ra(i),m(i),b(i)
c ber je greška merenja vezivne energije b
      ber(i)=0.001*b(i)
      ENDDO

      SUM=0.
      DO 22 I=1,NSTEP
      SUM=SUM+b(I)
   22 CONTINUE
c-----------------------------------------
  100 CONTINUE

c Sada kada su učitani ulazni podaci računa se hi-kvadrat, f.
c On je suma kvadrata odstupanja eksperimentalne vrednosti b
c od fitovane vrednosti fb, podeljena sa kvadratom eksperimentalne
c greške merenja ber.

      f=0.
      DO 21 I=1,NSTEP
      IF(b(i).LE.0.) GO TO 21
      xx=Nn(i)
```

```
      yy=Nz(i)
      fb=fun(xx,yy)
      f=f+(b(I)-fb)**2/(ber(i)**2)
 21   CONTINUE
      if(ic.eq.ic/25*25) WRITE(*,112) f,(par(i),i=1,5)
 112   FORMAT(' chi2=',f8.3,' par:',5(f7.3))

c-------------------------------------------------------

c Ovaj deo potprograma se izvršava kada se pozove FCN funkcija
c sa vrednošću IFLAG=3

      IF(IFLAG.NE.3) RETURN

c Računa se kvadrat odstupanja, hi2, eksperimentalne vrednosti od
c fita za svaku eksper. vrednost i to se smešta u izlazni
c fajl. U izlazni fajl se takodje upisuje eksp. vrednost vezivne
c energije b i fitovana vrednost fb.

      DO 2 I=1,NSTEP
      IF(b(I).LE.0.) GO TO 2
      XX=Nn(I)
      yy=Nz(i)
      FB=FUN(XX,yy)
      HI2=(b(I)-FB)**2/(ber(i)**2)
      WRITE(*,303) I,b(i),FB,HI2
      WRITE(26,303) I,b(I),FB,HI2
 303  FORMAT(10X,'N=',I3,' EXPR=',F8.2,' FUNCT=',F9.2,' HI2=',
     + F15.5)
  2    CONTINUE

      WRITE(26,*) ' CHI2=',F
      WRITE(*,2002) F,(PAR(I),I=1,5)
 2002  FORMAT(' chi2=',f8.3,' par:',5(f7.3))

      RETURN
      END

c Kraj potprograma

c-------------------------------------------------------

c Ovo mora da stoji u programu. Futil je ime potprograma
c koji poziva FCN potprogram ako za tim ima potrebe.
```

SUBROUTINE FUTIL
RETURN
END

c– –

c Ovo mora da stoji u programu. To je externi potprogram,
c (logička funkcija intrac) koji je deo CERN-ovskih biblioteka.

SUBROUTINE INTRAC
RETURN
END

c– –

c Ova funkcija, fun(x,y), je Weizseckerova formula za vezivnu
c energiju nukleona u funkciji broja neutrona i protona.

DOUBLE PRECISION FUNCTION fun(x,y)
COMMON/COMF/par(5)
REAL*8 par, A, B,x,y

c x je broj neutrona, y je broj protona.
c A je zbir prva četri sabirka u Weizsekerovoj formuli
c (zapremiunski, površinski, kulonovski, asimetrični),
c B je poslednji, peti član (sparivanje).
c Parametri su izraženi u MeV-ima, i vezivna energija se
c dobija u MeV-ima

$$\mathbf{A = par(1) * (x + y) - par(2) * (x + y) * *(2./3.)}$$

$$+ \quad \mathbf{- par(3) * (y * *2)/(x + y) * *(1./3.) - par(4) * (x - y) * *2/(x + y)}$$

$$\mathbf{B = par(5)/(x + y) * *0.5}$$

c U zavisnosti od toga da li je broj protona i neutrona
c paran, neparan ili kombinovano poslednji član ima pozitivan,
c negativan predznak ili je nula.
c Ako je parn broj protona i paran broj neutrona
c poslednji član u izrazu za vezivnu energiju ima pozitivan
c predznak.

IF ((mod(y,2.).eq.0.).and.(mod(x,2.).eq.0.)) THEN
fun=A+B

```
      ENDIF

c Ako je neparan broj protona i neparan broj neutrona
c poslednji član u izrazu za vezivnu energiju ima negativan
c predznak.

      IF (( mod(y,2.).ne.0.).and.(mod(x,2.).ne.0.)) THEN
      fun=A-B
      ENDIF

c Ako je parn broj protona i neparan broj neutrona ili obrnuto
c poslednji član u izrazu za vezivnu energiju je nula.

      IF ((( mod(y,2.).ne.0.).and.(mod(x,2.).eq.0.))
     + .or. (( mod(y,2.).eq.0.).and.(mod(x,2.).ne.0.))) THEN
      fun=A
      ENDIF

      RETURN
      END
```

8 Dodatak 2

U ovom dodatku nalazi se makefile pomoću kog se kompajlira fortranski program weizsecker.f iz Dodatka 1.. f77 je ime kompajlera. Opcija -n32 znači da se koriste prednosti 32-bitnog procesora. Opcijom -static postiže se pamćenje lokalnih varijabli. Opcijom -o weizsecker.e se daje ime izvršnom fajlu. U drugom redu je napisan path za CERN-ovsku biblioteku libpacklib.a.

```
all:
	f77 -n32 -static -o weizsecker.e weizsecker.f \
	/usr/people/simic/cern/98/lib/libpacklib.a
```

9 Dodatak 3

Ovde je dat deo fajla (w.dat) iz koga fortranski program (weizsecker.f) čita ulazne podatke. U prvom redu je dat ukupan broj redova sa podacima (928), a u ostalim redovima su po kolonama smeštene sledeće varijable: Nn (broj neutrona), Nz (broj protona), rn, rz, ra, m (atomska masa) i b (vezivna energija u MeV).

```
928
   2.0   2.0   1.2599   1.2599   1.5874    4.002603    28.295994
   3.0   3.0   1.4422   1.4422   1.8171    6.015121    31.995890
   4.0   3.0   1.5874   1.4422   1.9129    7.016003    39.245708
   5.0   3.0   1.7100   1.4422   2.0000    8.022486    41.278225
   3.0   4.0   1.4422   1.5874   1.9129    7.016928    37.601620
   4.0   4.0   1.5874   1.5874   2.0000    8.005305    56.499771
   5.0   4.0   1.7100   1.5874   2.0801    9.012182    58.165283
   6.0   4.0   1.8171   1.5874   2.1544   10.013534    64.977295
   7.0   4.0   1.9129   1.5874   2.2240   11.021658    65.481239
   3.0   5.0   1.4422   1.7100   2.0000    8.024606    37.738548
   4.0   5.0   1.5874   1.7100   2.0801    9.013329    56.314404
   5.0   5.0   1.7100   1.7100   2.1544   10.012937    64.750946
   6.0   5.0   1.8171   1.7100   2.2240   11.009305    76.205528
   7.0   5.0   1.9129   1.7100   2.2894   12.014353    79.574738
   8.0   5.0   2.0000   1.7100   2.3513   13.017780    84.453911
   3.0   6.0   1.4422   1.8171   2.0801    9.031039    39.035191
   4.0   6.0   1.5874   1.8171   2.1544   10.016856    60.317966
   5.0   6.0   1.7100   1.8171   2.2240   11.011433    73.440849
   6.0   6.0   1.8171   1.8171   2.2894   12.000000    92.162018
   7.0   6.0   1.9129   1.8171   2.3513   13.003355    97.108253
   .
   .
   .
 154.0  98.0   5.3601   4.6104   6.3164  252.081619  1881.281616
 153.0  99.0   5.3485   4.6261   6.3164  252.082947  1879.266846
 154.0  99.0   5.3601   4.6261   6.3247  253.084824  1885.592529
```

10 Dodatak 4

Ovde je dat deo fajla (w.out) u koji fortranski program (weizsecker.f) smešta rezultate.

11 Literatura

- Application Software Group, MINUIT FUNCTION MINIMIZATION AND ERROR ANALYSIS, CERN Program Library Long Writeup D506, Geneva 1992.
- Mendaš I., Milutinović P., Ignjatević D., 100 NAJKORISNIJIH FORTRANSKIH POTPROGRAMA, IP Dragon, Grupacija Mikro knjiga, Beograd 1991.
- Press W. H., Flannery B. P.,Teukolsky S. A., Vetterling W. T., NUMERICAL RECEPIES, Cambridge University Press, Cambridge 1986.
- Burcham W. E., NUKLEARNA FIZIKA, Naučna knjiga, Beograd 1974.
- Aničin I. V., OBRADA REZULTATA MERENJA, Univerzitet u Beogradu Fizički fakultet, Beograd 1990.
- Segre E., NUCLEI AND PARTICLES, W. A. Benjamin, Inc.,Advanced Book Programs, Massachusets 1977.