

OSL 测年中 CGC 法求 D_e 均值的计算方法之比较分析

刘瑞元^{1,2}, 赖忠平^{1,3}

(1. 中国科学院青海盐湖研究所, 青海 西宁 810008; 2. 中国科学院大学, 北京 100049;
3. 中国科学院寒区旱区环境与工程研究所, 甘肃 兰州 730000)

摘要: 光释光测年中等效剂量是计算样品埋藏年龄的一个重要参数, 一般通过求多个实验测量值的均值得出。标准生长曲线法是求等效剂量的一种常用且有效的方法, 分析讨论了此法计算的等效剂量存在小幅度的系统性的偏大及其原因, 提出了改进的方法; 展望了 CGC 法求 D_e 均值更优的估计——极大似然估计。

关键词: 标准生长曲线法; 等效剂量; 均值

中图分类号: P533

文献标识码: A

文章编号: 1008-858X(2012)04-0021-04

1 引言

光释光(OSL)测年中标准生长曲线法(CGC)是一种常用且有效的求等效剂量(D_e)的方法^[1]。已有研究证明可靠的 OSL 测年样品(如黄土)中, 同一样品普遍存在标准生长曲线, 结合目前普遍接受的单片再生剂量法建立的标准生长曲线便能较可靠而方便地测量样品的 D_e 。对于 D_e 分布集中且近似正态分布的样品, 可以 D_e 均值作为样品的等效剂量^[2-3]。根据剂量—响应关系^[2-4](D_e 与 L/T 的函数关系)由实验室测量的样品自然信号的 L/T 值计算 D_e 值, 求出 D_e 的均值作为样品的等效剂量, 再由公式: 年龄 = 等效剂量/年剂量率, 便得到样品的埋藏年龄。目前 CGC 法是先由每个测片的 L/T 求出对应的 D_e , 再求其算术平均作为样品的等效剂量。但 D_e 为实验室间接测量值, 是通过实验室直接测量值 L/T 计算得出。本文通过数学分析发现前法的计算结果存在系统性偏大, 提出先求实验室直接测量值 L/T 的均

值, 其对应的 D_e 为样品的 D_e 均值; 并与 SAR 计算的 D_e 均值进行了比较。

2 求均值的数学分析及结果比较

实验室测得的样品释光信号值要通过释光信号强弱与相应剂量的关系转换成样品所受到的辐照剂量值, Murray 等^[2]于 2000 年提出两种拟合剂量—响应曲线的方法, 即 L/T 与 D_e 的函数关系, 指数拟合及指数加线性拟合:

$$L/T = -k \cdot \exp(-b \cdot D_e) + k; \quad (1)$$

$$L/T = -k \cdot \exp(-b \cdot D_e) + c \cdot D_e + d; \quad (2)$$

其中 L 为实验室测量的样品释光信号, 一般为样品自然信号或实验室辐照一定的再生剂量后样品的释光信号, T 为实验室给定的测试剂量后的样品释光信号, L/T 为实验室直接测量值; D_e 为样品的等效剂量, 通过样品的自然信号 L/T 投影到标准生长曲线对应的 D_e 值得到, 为间接测量值; k, b, c, d 为曲线参数。

在 D_e 最大值达几百个 Gy 时, 指数加线性拟合得比较好, 而当测试的是年轻样品时两种

收稿日期: 2012-03-28; 修回日期: 2012-05-28

作者简介: 刘瑞元(1986-)男, 硕士研究生, 主要研究方向为测年数据分析。E-mail: lry201105@163.com。

拟合的结果相近^[14-5]。由实验室直接测得的 L/T 根据 (1) 或 (2) 式得到 D_e 时, 可先求出它们的反函数, 即 D_e 关于 L/T 的表达式, 再求非线性方程的解析解或数值解; 或通过数值分析直接得出 D_e 。但对于 (2) 式其反函数只能求得数值解, 无法得到其解析表达式。为讨论方便, 我们以 (1) 式为例计算其反函数, 得到 D_e 关于 L/T 的函数关系式。并且一般曲线参数 c 的数量级为 10^{-2} 或更小, 在讨论样品生长曲线函数时 (2) 式中第二项 “ $c \cdot D_e$ ” 可近似为一常数项。因此本文以下式作为剂量—响应曲线拟合方程具有一定代表性:

$$L/T = -k \cdot \exp(-b \cdot D_e) + C. \quad (3)$$

其中 C 为曲线参数, 其反函数为:

$$D_e = -\frac{1}{b} \ln \frac{L/T - C}{-k}. \quad (4)$$

因为对数函数 $f(x) = \ln(x)$ 中的自变量 x 取值范围为 $(0, +\infty)$, 即 $x > 0$, 且曲线拟合得到的参数 $C > L/T$, 所以 (4) 式改写为:

$$D_e = -\frac{1}{b} \ln \frac{C - L/T}{k}. \quad (5)$$

求均值的数学处理方法, 依数据不同的性质而定。对于求直接测量值的均值, 若为离散数列, 有算术平均、调和平均、平方平均和几何平均, 常用的较简便的是算术平均; 若为连续数列, 一般使用积分法。但是很多物理量须通过函数关系由直接测量值间接求得, 称为间接测量值, 其均值求法有两种。一是先由直接测量值通过函数关系求得对应的间接测量值, 再求算术平均值作为间接测量值的测量值; 二是先求直接测量值的均值, 再代入函数关系求得的结果作为间接测量值。对于光释光测年中 CGC 法求等效剂量的均值, 方法如下。

$$\text{法一 (CGCD}_e^1\text{): } \bar{D}_{e1} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n D_{ei}. \quad (6)$$

法二 (CGCD_e²):

$$\bar{D}_{e2} = -\frac{1}{b} \ln \frac{C - \overline{(L/T)}}{k}, \quad (7)$$

$$\overline{(L/T)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (L/T)_i. \quad (8)$$

法一由所测量的若干个 $\bar{D}_e$ 的标准偏差作为 $\bar{D}_e$ 误差; 法二可根据泰勒公式^[6] 计算 $\bar{D}_e$ 误差 (以指数拟合为例)。

$$\begin{aligned} \Delta D_e &= D_e [\overline{L/T} + \Delta(L/T)] - D_e (\overline{L/T}) \\ &= D_e' (\overline{L/T}) \cdot \Delta(L/T) + \frac{1}{2!} D_e'' (\overline{L/T}) \\ &\quad \cdot \Delta(L/T)^2 + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

省略号表示 D_e 关于 $\Delta(L/T)$ 的高阶小量, 在误差许可范围内一般只取上式中的第一项^[6],

$$\Delta D_e \approx \frac{\Delta(L/T)}{b \cdot (C - L/T)}. \quad (10)$$

如果采用数值分析, 则法一和法二还可据 (2) 式直接计算 D_e 和 D_e 误差, 本文不作详述。对于 SAR 法求 D_e 和 D_e 误差, 相关文献^[7-8] 有专门研究, 在此不再赘述。由以上分析及本所释光测年实验室测试的 22 个样品数据, 对同一样品和测片采用 3 种算法 (SAR D_e 、CGC D_e^1 和 CGC D_e^2) 的 D_e 均值结果如表 1。

从表 1 可知 SAR 法与 CGC 法计算的 D_e 均值在误差范围内大部分是相近的, 但也存在一定的偏差。要使这两种方法计算的等效剂量在误差范围内更为一致, 必须采用更优的 D_e 参数估计法——极大似然估计。由表 1 和图 1 可知, 从年轻到较老的样品都反映前法 (CGC D_e^1) 计算的 D_e 与本文提出的 D_e 均值算法比较有小幅度系统性的偏大。虽然偏大的幅度很小且在误差允许范围内, 但此系统性的偏大是否合理, 有待下一步讨论。

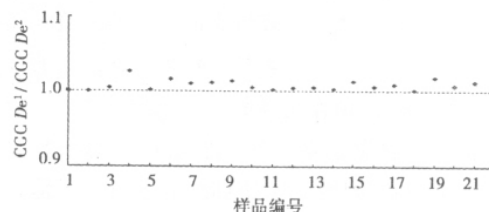


图1 CGC D_e^1 /CGC D_e^2 示意图

Fig.1 The sketch map of CGC D_e^1 /CGC D_e^2

3 讨论

为简便起见, 设 $y = D_e$, $x = L/T$, 则由 5 式得 $y = -1/b \ln [(C - x)/k]$ 。只考虑两个测量值: $x + \Delta x_1$ 、 $x + \Delta x_2$ 。假设 x 和 y 是理论上的真实值, Δx_1 和 Δx_2 是两次直接测量引起的测量误差, 即与真实值偏离的大小。现讨论两种算

法(CGC D_e^1 和 CGCD D_e^2) 结果之均值与真实值的
偏离程度。

$$\bar{y}_1 = \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{b} \ln \left[\frac{C - (x + \Delta x_1)}{k} \right] - \frac{1}{b} \ln \left[\frac{C - (x + \Delta x_2)}{k} \right] \right), \quad (11)$$

$$\bar{y}_2 = -\frac{1}{b} \ln \left(\frac{1}{k} \left[C - \frac{1}{2} (2x + \Delta x_1 + \Delta x_2) \right] \right), \quad (12)$$

$$|\bar{y}_1 - y| = \frac{1}{b} \ln \frac{C - x}{\sqrt{[C - (x + \Delta x_1)] [C - (x + \Delta x_2)]}}, \quad (13)$$

$$|\bar{y}_2 - y| = \frac{1}{b} \ln \frac{C - x}{C - (2x + \Delta x_1 + \Delta x_2) / 2}. \quad (14)$$

函数 $f(x) = \ln(x)$ 为单调递增函数, 上两式
中区别在于分母, 分母越大则与真实值的偏离程
度越小, 而问题转化为比较下两式的大小。令:

$$g_1(x) = \sqrt{[C - (x + \Delta x_1)] [C - (x + \Delta x_2)]}, \quad (15)$$

$$g_2(x) = C - (2x + \Delta x_1 + \Delta x_2) / 2; \quad (16)$$

两式分别两边平方:

$$g_1^2(x) = C^2 - 2Cx - C(\Delta x_1 + \Delta x_2) + x^2 + x(\Delta x_1 + \Delta x_2) + \Delta x_1 \Delta x_2, \quad (17)$$

$$g_2^2(x) = C^2 - 2Cx - C(\Delta x_1 - \Delta x_2) + x^2 + x(\Delta x_1 + \Delta x_2) + \left(\frac{\Delta x_1 + \Delta x_2}{2} \right)^2; \quad (18)$$

据重要不等式,

$$ab \leq \left(\frac{a+b}{2} \right)^2, \quad a, b \in R, \quad (19)$$

得 $g_1^2(x) \leq g_2^2(x)$, $|\bar{y}_2 - y| \leq |\bar{y}_1 - y|$, 即从
数据处理方法优劣考虑, 法二更佳。

为更形象说明 CGC D_e^1 和 CGC D_e^2 计算结
果的差异, 作剂量—响应函数关系图 2。

表 1 3 种求均值方法的结果比较

Table 1 Contrast among the calculated means from three methods

样品编号	SAR D_e	CGC D_e^1	CGC D_e^2	SAR D_e / CGC D_e^1	SAR D_e / CGC D_e^2	CGC D_e^1 / CGC D_e^2	CGC D_e^1 - CGC D_e^2
1	0.48	0.48	0.48	1.00	1.00	1.00	0.00
2	1.38	0.93	0.93	1.49	1.48	1.00	0.00
3	5.13	4.77	4.75	1.08	1.08	1.00	0.02
4	17.16	15.72	15.31	1.09	1.12	1.03	0.41
5	22.53	21.95	21.92	1.03	1.03	1.00	0.03
6	28.60	28.54	28.09	1.00	1.02	1.02	0.45
7	39.20	39.11	38.72	1.00	1.01	1.01	0.39
8	47.04	52.15	51.54	0.90	0.91	1.01	0.61
9	53.18	54.46	53.72	0.98	0.99	1.01	0.74
10	65.29	65.07	64.75	1.00	1.01	1.00	0.32
11	74.95	74.24	74.10	1.01	1.01	1.00	0.14
12	97.34	94.96	94.51	1.03	1.03	1.00	0.45
13	100.14	98.57	98.10	1.02	1.02	1.00	0.47
14	103.25	103.73	103.43	1.00	1.00	1.00	0.30
15	104.46	104.44	103.04	1.00	1.01	1.01	1.40
16	116.49	111.97	111.34	1.04	1.05	1.01	0.63
17	128.37	98.69	97.80	1.30	1.31	1.01	0.89
18	193.26	186.43	186.10	1.04	1.04	1.00	0.33
19	344.86	327.01	321.14	1.05	1.07	1.02	5.87
20	446.81	445.40	442.20	1.00	1.01	1.01	3.20
21	448.63	486.59	480.44	0.92	0.93	1.01	6.15
22	493.21	494.29	493.19	1.00	1.00	1.00	1.10

注: 第 2、3、4、8 列数据的单位为 Gy, 其中第 8 列数据为差值; 第 5、6、7 列数据为比值

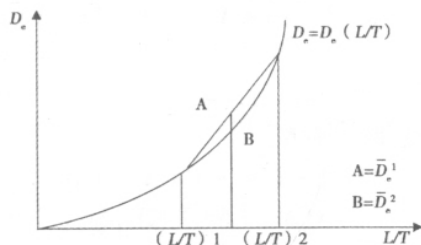


图 2 $\bar{D}_e^1$ 与 $\bar{D}_e^2$ 在剂量—响应曲线上的位置关系

Fig. 2 The $\bar{D}_e^1$ and $\bar{D}_e^2$ on the dose-response curve

为在区间 $(0, +\infty)$ 单调递增的凹函数, 因此 $\bar{D}_e^1 > \bar{D}_e^2$ 在数轴上的位置如图 3。

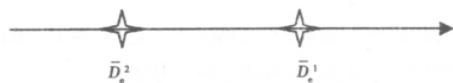


图 3 两种方法求得的 D_e 均值在坐标轴上的位置

Fig. 3 D_e mean values obtained from two methods on the axis

4 结论与展望

OSL 测年中 CGC 法求 D_e 均值作为样品等效剂量的方法在很多测年样品(如风成沉积物)中简便可靠,但目前在数据处理过程中存在一个小小的不足。本文通过数学分析及不同方法的计算结果比较提出改进的方法,指出造成前法不足之处的原因。CGC 法以 D_e 均值作为样品等效剂量极易受极端值影响而并非最优

估计,此法与 SAR 法计算的结果在误差范围内相近。为更好地结合 CGC 法与 SAR 法的优点,CGC 法可借鉴 SAR 法求每个测片的 D_e 误差进而计算 D_e 的极大似然估计,可更好逼近代表样品真实埋藏年龄的等效剂量值。

参考文献:

- [1] Roberts H M, Duller G A T. Standardised growth curves for optical dating of sediment using multiple-grain aliquots [J]. *Radiation Measurements* 2004 38(2): 241–252.
- [2] Murray A S, Wintle A G. Luminescence dating of quartz using an improved single-aliquot regenerative-dose protocol [J]. *Radiation Measurements* 2000 32(1): 57–73.
- [3] Wintle A G, Murray A S. A review of quartz optically stimulated luminescence characteristics and their relevance in single-aliquot regeneration dating protocols [J]. *Radiation Measurements* 2006 41(4): 369–391.
- [4] Murray A S, Buylaert J P, Henriksen M *et al.* Testing the reliability of quartz OSL ages beyond the Eemian [J]. *Radiation Measurements* 2008 43(2–6): 776–780.
- [5] Pawley S M, Bailey R M, Rose J *et al.* Age limits on Middle Pleistocene glacial sediments from OSL dating, north Norfolk, UK [J]. *Quaternary Science Reviews* 2008 27(13–14): 1363–1377.
- [6] 同济大学数学系. 高等数学(上册) [M]. 北京: 高等教育出版社, 2007: 121–139.
- [7] Galbraith R F. A note on the variance of a background-corrected OSL count [J]. *Ancient TL* 20 2002: 49–51.
- [8] Duller G A T. Assessing the error on equivalent dose estimates derived from single aliquot regenerative dose measurements [J]. *Ancient TL* 25 2007: 15–24.

The Contrast of Different Calculation Methods for Seeking D_e Mean by CGC of OSL Dating

LIU Rui-yuan^{1,2}, LAI Zhong-ping^{1,3}

(1. Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xining 810008, China;

2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3. Cold and Arid Regions Environmental and Engineering Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China)

Abstract: Equivalent dose is one of the important parameters in calculating the burial age of the sample on the OSL dating. Generally it's taken more than one experimental values to seek the mean as the sample's equivalent dose. Common growth curve method (CGC) is valid and common to solve the equivalent dose, this study discovered that there is a small systematic deviation in nowadays' CGC and discussed its reason, and the improved methods were proposed. A prospect of more superior method to solve the equivalent dose, CGC method-maximum likelihood estimation, were given.

Key words: Standard growth curve; Equivalent dose; Mean value