

U-Pb 一致线年龄数据处理程序系统

赵敦敏

(中国地质科学院地质研究所)

[摘要] 锆石 U-Pb 一致线年龄测定法的数据处理是一项繁难而复杂的工作。为了合理、准确、迅速地处理测试数据,及时获得可靠的结果,作者采用系统扩展 BASIC 高级语言^[1],开发 HP9836 计算机的功能,编辑了这套 U-Pb 一致线年龄数据处理程序系统。本程序适用于 HP200 系列计算机和 HP9872C 绘图仪。实际使用证明,程序运行灵活方便,可以迅速得到准确可靠的一致线年龄结果及图解,显著地提高了数据处理工作的水平和效率。

在地质年代学及岩石演化研究中 U-Pb 一致线年龄测定法已成为一种广泛应用的有力手段。然而 U-Pb 法的数据处理却是一项繁难复杂的工作。为了合理、准确、迅速地处理测试数据,及时获得可靠的结果,作者采用系统扩展 BASIC 高级语言编辑了这套程序。本程序基于 YORK^[2] 的最小二乘法拟合直线分析方法及 LUDWIG^[3] 的双曲线包络误差计算法,适用于 HP200 系列计算机和 HP9872C 绘图仪。实际应用证明,这套程序运行灵活方便,可以迅速得到准确可靠的 U-Pb 一致线年龄结果和图解,显著地提高了数据处理工作的水平和效率,对于开发 HP200 系列计算机的功能也是一次成功的尝试。

U-Pb 一致线年龄数据处理程序系统包括:不一致直线的最小二乘法拟合分析程序;一致线图解年龄和误差计算程序;最佳拟合直线选取程序;一致线图解绘图与联机绘图程序以及数据存取程序。这些工作程序由主程序联在一起构成了一套完整的 U-Pb 一致线年龄数据处理程序系统。下文详细介绍数据处理所用的数学模型和程序结构以及应用实例。

一、主 程 序

主程序由数据输入和功能选择两部分组成,参见图 1 主程序流程图。

在 WETHERILL^[4] 的 $^{207}\text{Pb}/^{235}\text{U}$ - $^{206}\text{Pb}/^{238}\text{U}$ 一致线图解中,令数据点的横座标 $X = ^{207}\text{Pb}/^{235}\text{U}$,纵座标 $Y = ^{206}\text{Pb}/^{238}\text{U}$ 。首先以人机对话方式输入样品名称 Snum 和数据点数目 N,依照屏幕上显示的点号输入 X_i 和 Y_i 值。数据误差用统一的相对偏差计算标准方差:

1989 年 11 月 20 日收

$$\Delta X_i^2 = (X_i \cdot 0.005)^2$$

$$\Delta Y_i^2 = (Y_i \cdot 0.005)^2$$

屏上显示报告题目、日期、数据表及一组功能键:

- 0——更正数据点数目 N
- 2——调用更正 X 工作程序
- 4——调用更正 Y 工作程序
- 6——调用计算机时钟功能
- 9——结束更改、调用一致线图解年龄及误差计算程序,打印报告

MODIFY N		MODIFY X		MODIFY Y
	DATE & TIME			END MODIFY

根据原始数据核对屏幕显示数据表,改正错误数据,结束数据输入,转第二部分主程序。

主程序的第二部分调用最小二乘法拟合分析程序、一致线图解年龄和误差计算程序、打印输出年龄报告、屏上显示 46 亿年一致线图解。根据年龄报告和图解选择以下两套功能键。

屏幕图解功能键:

- 0——屏幕显示任意年限的图解程序
- 1——试选最佳拟合直线程序
- 2——屏幕显示数据点分布放大图程序
- 3——打印输出年龄报告
- 4——转第二套功能键,即绘图仪联机绘图程序
- 5——打印输出屏幕显示的图解
- 6——确定最佳拟合直线程序
- 8——报告存储程序
- 9——结束运行

CRT GRAPH	SELECT LINE	INNER GRAPH	DATA REPORT	TO9872C PLOT
DUMP GRAPH	OPTIMUM LINE		SAVE DATA	END WORK

绘图仪联机绘图功能键:

- 0——绘一致线图解
- 1——绘数据点分布放大图
- 4——返回前一组功能
- 5——绘多条不一致直线
- 6——多条不一致直线的数据点分布放大图
- 8——报告存储程序
- 9——结束运行

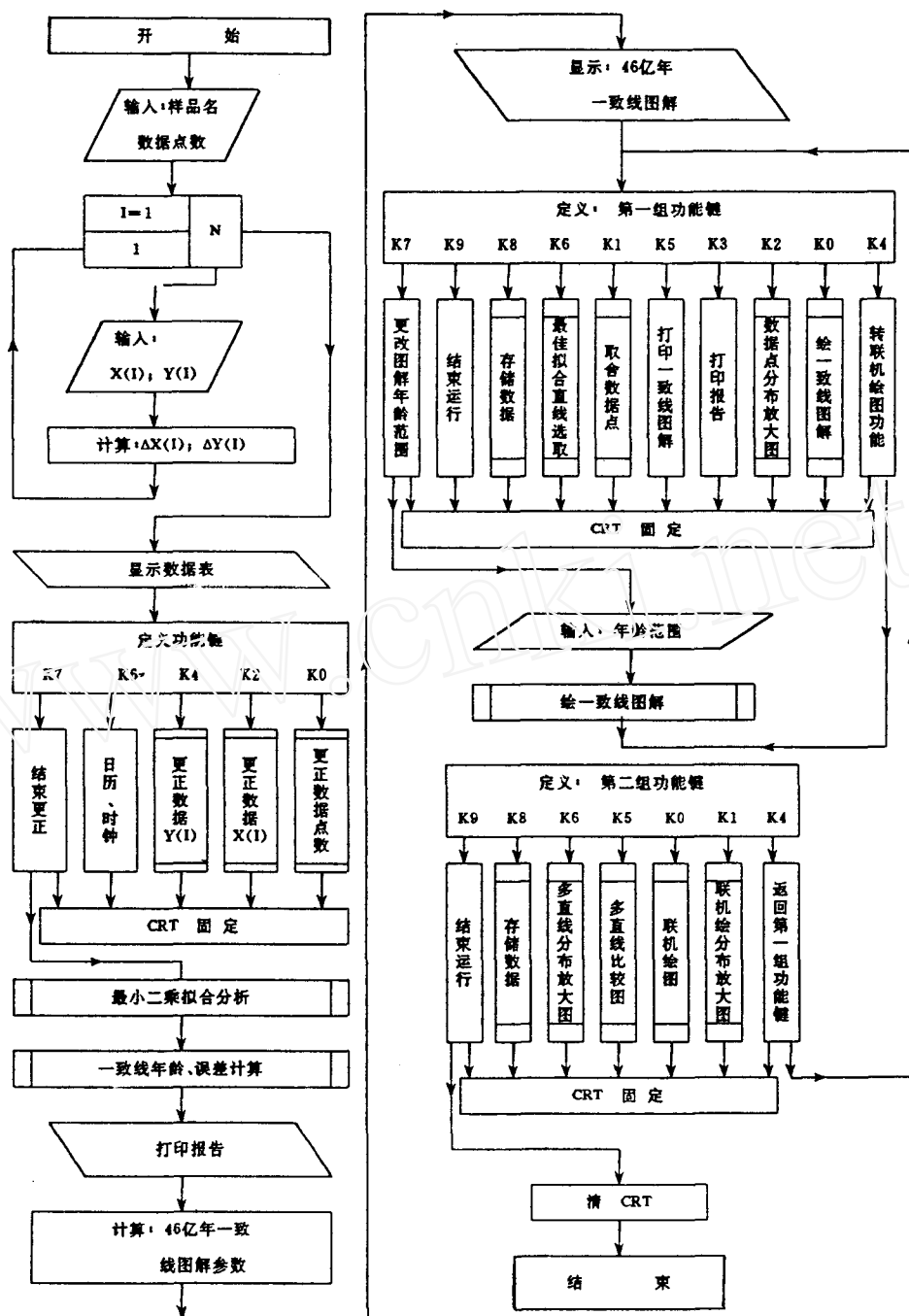


图 1 主程序流程图

PLOTTER GRAPH	INNER PLOT			RETURN CRT
MULTI PLOT	MULTI INNER		SAVE DATA	END WORK

在程序系统中,主程序仅是框架,其功能由各工作程序实现。下文依次主要工作程序。

二、更正输入数据 X、Y 程序

以人机对话方式输入数据难免出错,为此编辑了使用旋钮控制纵向游动光标更改数据表的程序。

首先,屏幕显示输入的 X 或 Y 数据表,定义旋钮光标的工作状态和纵向游动座标。随后定义辅助的显示功能键。

2——更正数据

9——结束更改

敲 2 号键,向右转旋钮,屏上出现箭头光标。光标纵向游动由光标控制子程序完成。首先定义座标,SELECT KNOBX。而后显示箭头光标,DISP KNOBX。移动时消去原位光标,同时在新位显示光标。光标所指数据处于“激活”状态。敲“ENTER”键,屏上显示该数据的标号,要求输入正确数值。一旦输入新数据,屏上原数据立即变为新值。屏幕显示实例如下:

No.	DATA X
1	8.8501
⇒ 2	8.5838
3	8.4996
4	8.3894
5	8.3351

		MODIFY X		
				END MODIFY

三、不一致直线的最小二乘法拟合分析程序

在 WETHERILL^[4] 的 $^{207}\text{Pb}/^{235}\text{U}$ - $^{206}\text{Pb}/^{238}\text{U}$ 一致曲线图解中,X 与 Y 误差无关。因此采用 YORK 的最小二乘法拟合直线计算方法时,误差相关系数为零。回归公式简化为

$$S = \sum_i W_i (Y_i - bX_i - a)^2$$

其中 $W_i = \frac{1}{b^2 \cdot \omega(Y_i) + \omega(X_i)}$ 为直线的权重。 $\omega(X_i)$ 和 $\omega(Y_i)$ 分别是 X 和 Y 的权重, 此处分别取各自的标准平方差, 即 $\omega(X_i) = \Delta X_i^2$, $\omega(Y_i) = \Delta Y_i^2$ 。令 $W = \sum_i W_i$, 则直线的重心 $(\bar{X}, \bar{Y})$ 为:

$$\bar{X} = \sum_i W_i \cdot X_i / W$$

$$\bar{Y} = \sum_i W_i \cdot Y_i / W$$

令 $Z_i = W_i \cdot [\omega(Y_i) \cdot U_i + b \cdot \omega(X_i) \cdot V_i]$, $Z = \frac{\sum_i W_i \cdot Z_i}{W}$, 则直线斜率为

$$b = \sum_i W_i \cdot Z_i \cdot V_i / \sum_i W_i \cdot Z_i \cdot U_i$$

此处 U_i 和 V_i 分别是数据点 $X_i Y_i$ 的残量, 即

$$U_i = X_i - \bar{X}, \quad V_i = Y_i - \bar{Y}$$

直线的最佳斜率用迭代法计算。最佳截距为:

$$a = \bar{Y} - b \cdot \bar{X}$$

这样便得到了直线方程

$$Y = bX + a$$

$$Q = 1 / \sum_i W_i \cdot [U_i \cdot V_i / b + 4 \cdot (Z_i - Z) \cdot (Z_i - U_i)]$$

$$S = \sum_i W_i \cdot (a + b \cdot X_i - Y_i)^2$$

最佳斜率的误差为

$$\sigma_b = Q^2 \cdot S \cdot \{ \sum_i W_i^2 \cdot [U_i^2 \cdot \omega(Y_i) + V_i^2 \cdot \omega(X_i)] \} / (N - 2)$$

最佳截距的误差为

$$\sigma_a = S \cdot \left[\frac{1}{W} + 2 \cdot (\bar{X} + 2Z) \cdot Z \cdot Q + (\bar{X} + 2Z)^2 \cdot \sigma_b^2 \right] / (N - 2)$$

最佳直线的平均标准偏差为

$$MSWD = \sum_i W_i \cdot (b \cdot U_i - V_i)^2 / (N - 2)$$

在程序中, 上述数据按先后顺序计算, 流程图从略。

四、一致线图解年龄、误差计算程序

根据 LUDWIG 提出的数学模型, 用迭代法计算一致曲线与最佳直线的交点年龄及误差。在 $^{206}\text{Pb}/^{238}\text{U}$ - $^{207}\text{Pb}/^{235}\text{U}$ 一致曲线图解中, 一致曲线的参量方程是

$$Y = f_y(t) \quad f_y(t) = e^{t \cdot \lambda_{238}} - 1$$

$$X = f_x(t) \quad f_x(t) = e^{t \cdot \lambda_{235}} - 1$$

此处 t 是一致曲线上的年龄值, λ_{238} 和 λ_{235} 是铀的衰变常数, 分别为 1.5513×10^{-4} 和 9.8485×10^{-4} 。由参量方程得

$$t = \ln(1 + X) / \lambda_{235} \quad (1)$$

$$Y = e^{t \cdot \lambda_{238}} - 1 \quad (2)$$

由前一程序获得最佳直线方程

$$Y = bX + a \quad (3)$$

根据 $^{207}\text{Pb}/^{238}\text{U}$ 的实际意义, X 由 100 至 0.5 取值, 将每个 X 值依次代入 (1)(2)(3) 式, 计算出两个 Y 值。对应于两个 Y 值之差最小值的 t 值作为下面迭代法计算交点年龄的试探值 t_1 。

$$\text{令} \quad M = \frac{df_y(t_1)}{df_x(t_1)} \quad (4)$$

$$B = f_y(t_1) - M \cdot f_x(t_1) \quad (5)$$

$$X_1 = \frac{a - B}{M - b} \quad (6)$$

$$t_2 = f_t(X_1) \quad (7)$$

此处 $f_t(X_1)$ 是 $f_x(t)$ 的反函数。将试探值 t_1 依次代入上述各式, 算得 t_2 。再取新的 $t_1 = t_2$, 重复上述计算直到 $t_1 \approx t_2$, 即 t_1 与 t_2 之差达到预期的精度, 此时 t_2 即为所求交点年龄。

交点年龄的误差采用双曲线包络法计算。双曲线方程是

$$Y = a + b \cdot X \pm \sqrt{\Delta a^2 + \Delta b^2 \cdot X \cdot (X - 2\bar{X})}$$

此方程是一对沿 Y 轴、以最佳直线为对称轴的双曲线, 在最佳直线的重心处面积最狭窄 (见图 2 双曲线包络年龄误差示意图)。包络线与一致曲线的交点为所求年龄误差值。选取交点年龄为试探值用迭代法计算误差值。

$$\text{令} \quad D = 2[(B - a) \cdot (M - b) + \bar{X} \cdot \Delta b^2] \quad (8)$$

$$E = (M - b)^2 - \Delta b^2 \quad (9)$$

$$V = (B - a)^2 - \Delta a^2 \quad (10)$$

$$X_1 = \frac{-D \pm \sqrt{D^2 - 4EV}}{2E} \quad (11)$$

$$t_2 = \ln(1 + X_1) / \lambda_{235} \quad (12)$$

将试探值 t_1 依次代入 (4) 式、(5) 式以及 (8) 至 (12) 式, 计算出 t_2 , 取 $t_1 = t_2$, 重复上述计算直到 $t_1 \approx t_2$, 即 t_1 与 t_2 之差达到规定精度。 t_2 与交点年龄之差即为所求年龄误差。显然, 上下交点各有一对正负年龄误差。

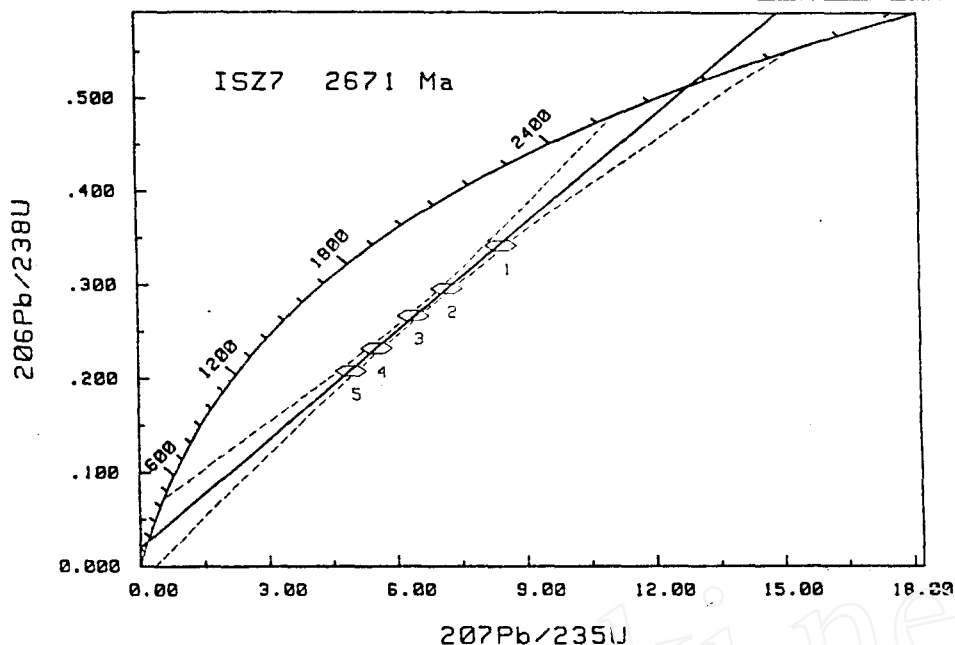


图2 双曲线包络年龄误差示意图

五、一致线图解绘图程序

为了调用灵活绘图程序分为两部分,前半部分自动计算并选定绘图参数,后半部分在屏幕上绘制一致线图解。

事实上,一致曲线上的年龄与其对应的 X、Y 座标均为指数函数关系而非线性关系,本方法所测样品的年龄范围又极为宽阔,从几十百万年到几十亿年。这必然使自动选择 X、Y 轴量程及刻度复杂化。因此采取年龄分区确定参数的方法,使任何年龄的样品都可自动获得一幅满意的图解。

此工作程序以人机对话方式开始,输入所需的年龄上下限。根据一致线的参量方程计算出对应的 X、Y 上下限。从几十百万年至几十亿年分为四个区间:270Ma 以下,270~500Ma,500~1900Ma,1900Ma 以上。各个区间一致线年龄刻度和 X、Y 轴量程、刻度的计算方法均不相同。程序将输入的上下限年龄值送入相应的区间,计算量程、刻度等参数,随后转入后半部分绘图图解程序。

绘制图解程序首先规定绘图地址 PLOTTER IS 3, "INTERNAL", 调出绘图功能 GRAPHICS ON, 确定图幅和位置 VIEWPORT, 定义绘图单位 WINDOW 和 X、Y 轴的量程及刻度 AXES, 随后绘一致线图解。

六、数据点分布放大图程序

在实际图解中,往往会出现这样的情况,几个数据点密集在一起,排列形式很不明显。

为此,编写了这个程序,在一致线图解内的右下角绘出局部数据点分布放大图,把数据点散开,其排列形式一目了然。

数据点分布放大图亦采用自动定义绘图参数。首先以人机对话方式输入放大图的年龄上下限,计算出 X 值的上下限及跨度 X_{range} 。随后以 $X_{range}=0.3$ 为界分为两个区间分别计算一致曲线、 X 轴和 Y 轴的量程及刻度。最后绘出数据点分布清晰的放大图解。

七、最佳拟合直线选取程序

在一致线图解中,有时数据点较为离散,其中个别点远离不一致直线,引入很大的参数误差,对交点年龄及精度影响极大。究其原因,往往是实验测试出现问题所致。一旦舍去这种数据点,年龄误差会大大改善。这个工作程序可任意取舍数据点,解析一条新的不一致直线,获得新的交点年龄。如此,在图解中可以画出几条不一致直线进行比较,选定一条合理的最佳不一致直线,其对应的交点年龄作为报告结果。图 3 为一应用实例。

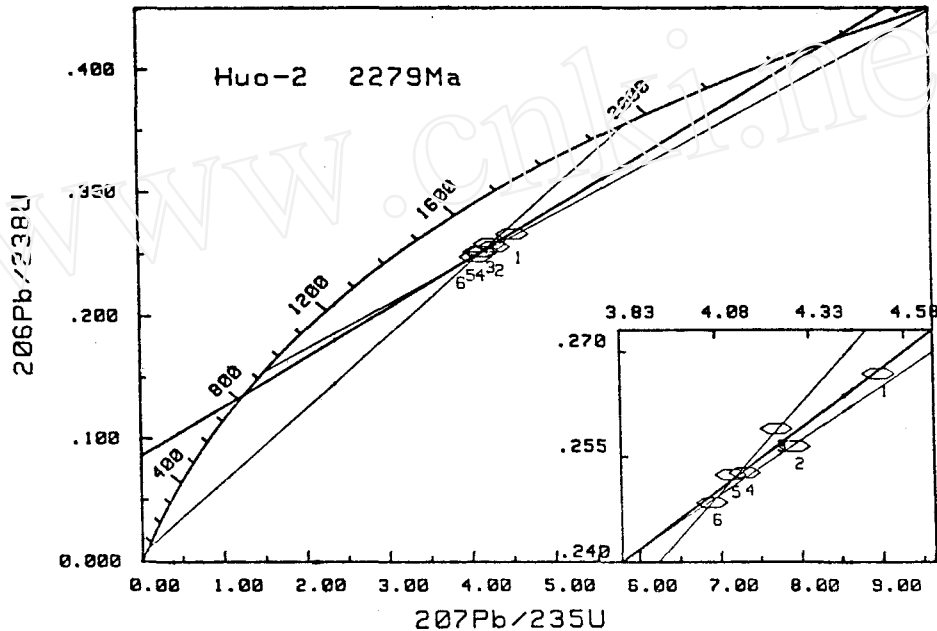


图 3 最佳拟合直线选取程序应用示意图

程序开始运行,以人机对话方式取舍数据点。而后调用最小二乘法拟合分析程序和一致线图解年龄、误差计算程序,打印出新的数据表和年龄报告,在荧光屏上原图解中画出新的不一致直线。经过比较,确定最佳拟合直线,其它直线从图中消失,最后打印出最终图解及年龄报告。

八、联机绘图程序

联机绘图程序用 HP 专用绘图语言编制,变量绘图参数以字符串形式传递给绘图仪

程序运行后,屏幕上显示绘图笔配置表及显示功能键:

	Line #	Parameter	
	1	Frame colour;	1
	2	X-axis colour;	5
⇒	3	Y-axis colour;	5
	4	Concordant curve colour;	2
	5	Discordant line colour;	3
	6	Point mark colour;	4
	7	Title colour;	3
	8	Comment colour;	7

		MODIFY LINE	SAVE COLOUR	
				END MODIFY

2——修改行内文字

3——存储绘图笔颜色配置表

9——结束修改

右旋光标旋钮,屏幕出现箭头光标,使光标对准需要修改的参数行。敲“ENTER”键,输入新参数值,表中原参数立即变为新值。敲功能键 3,配置表随即存入软盘。敲 9 号功能键,结束更改,以人机对话方式定义数据点标记图型。屏上显示可供选择的八种标记图型,其中有锆石晶体形、三解形、菱形、方形等。数据点的标记依次输入后,绘图仪立即绘出一张可直接出版的一致线图解。

九、数据存取程序

数据存取程序用来将年龄报告按采样区域存储在软磁盘上,每个资料软盘都拷贝了调出程序便于随时调用报告。

程序开始运行,屏幕显示指令:“将软盘插入左磁盘机,敲 CONTINUE 键!”随后输入本报告的文件名,立即在软盘上建立文件。下面依次输入所有数据点的粒度、磁性、重量、放射成因铅含量、全铅含量、铀含量、 $^{206}\text{Pb}/^{204}\text{Pb}$ 比值和 $^{207}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ 比值。数据按输入顺序存入软盘文件,最后存入不一致直线参数、年龄结果及一致线图解参数。存储结束后屏幕显示一个已存入文件的数据表供核对。表 1 是一个表格实例。

数据调出程序操作极为简单。程序开始运行后只要输入文件名称打印机立即输出一份包括数据存储表和一致线图解的完整的年龄报告。

表 1 数据存储表

Sample number: CF84-5										
				(PPm)			Atomic Ratio			
No.	Gra.	Mag.	Wt. (mg)	Rad. Pb	Total Pb	U	206/204 Pb Pb	207/206 Pb Pb	206/238 Pb U	207/235 Pb U
1	>240	NM1	2.76	350.00	267.00	1956.0	1050	.155810	.1677400	3.603500
2	<300	NM1	.28	521.00	525.70	2196.0	3004	.157490	.2203900	4.785600
3	>134	NM1	2.53	414.20	435.20	1423.0	1038	.154770	.2743800	5.855300
4	>100	NM2	.14	1592.00	1660.30	5424.0	1196	.154280	.2799500	5.955100
5	>300	NM2	3.00	477.00	490.61	1479.0	1803	.155980	.3016500	6.487600

十、应 用 举 例

表 2 锆石样品 J8838 计算机输出数据处理数据表及一致线年龄报告

No.	207/235 data X	X SQR DEV Varx	206/238 data Y	Y SQR DEV Vary
1	8.850100	2.0E-03	.395850	3.9E-06
2	8.583800	1.2E-03	.387130	3.7E-06
3	8.499600	1.8E-03	.382270	3.7E-06
4	8.389400	1.8E-03	.377820	3.6E-06
5	8.335100	1.7E-03	.376010	3.5E-06

N=5

Iteration times M=3

Slope=+.3949E-01 +/- .43E-05

Intercept=+.4693E-01 +/- .31E-03

MSWD=1.1E-01

UPPER INTERCEPT AGE=2514Ma +23Ma -19Ma

LOWER INTERCEPT AGE=418Ma +155Ma -157Ma

表 3 计算机输出的锆石样品 DL 38-18 数据处理数据表和一致线年龄报告

No.	207/235 data X	X SQR DEV Varx	206/238 data Y	Y SQR DEV Vary
1	1.478400	5.5E-05	.127850	4.1E-07
2	1.396800	4.9E-05	.121330	3.7E-07
3	1.311200	4.3E-05	.119740	3.6E-07
4	1.216700	3.7E-05	.113850	3.2E-07
5	1.195000	3.6E-05	.112130	3.1E-07

N=5

Iteration times M=3

Slope=+.5202E-01 +/- .28E-04

Intercept=+.5033E-01 +/- .48E-04

MSWD=3.2E+00

UPPER INTERCEPT AGE=1950Ma +182Ma -160Ma

LOWER INTERCEPT AGE= 533Ma +37Ma -44Ma

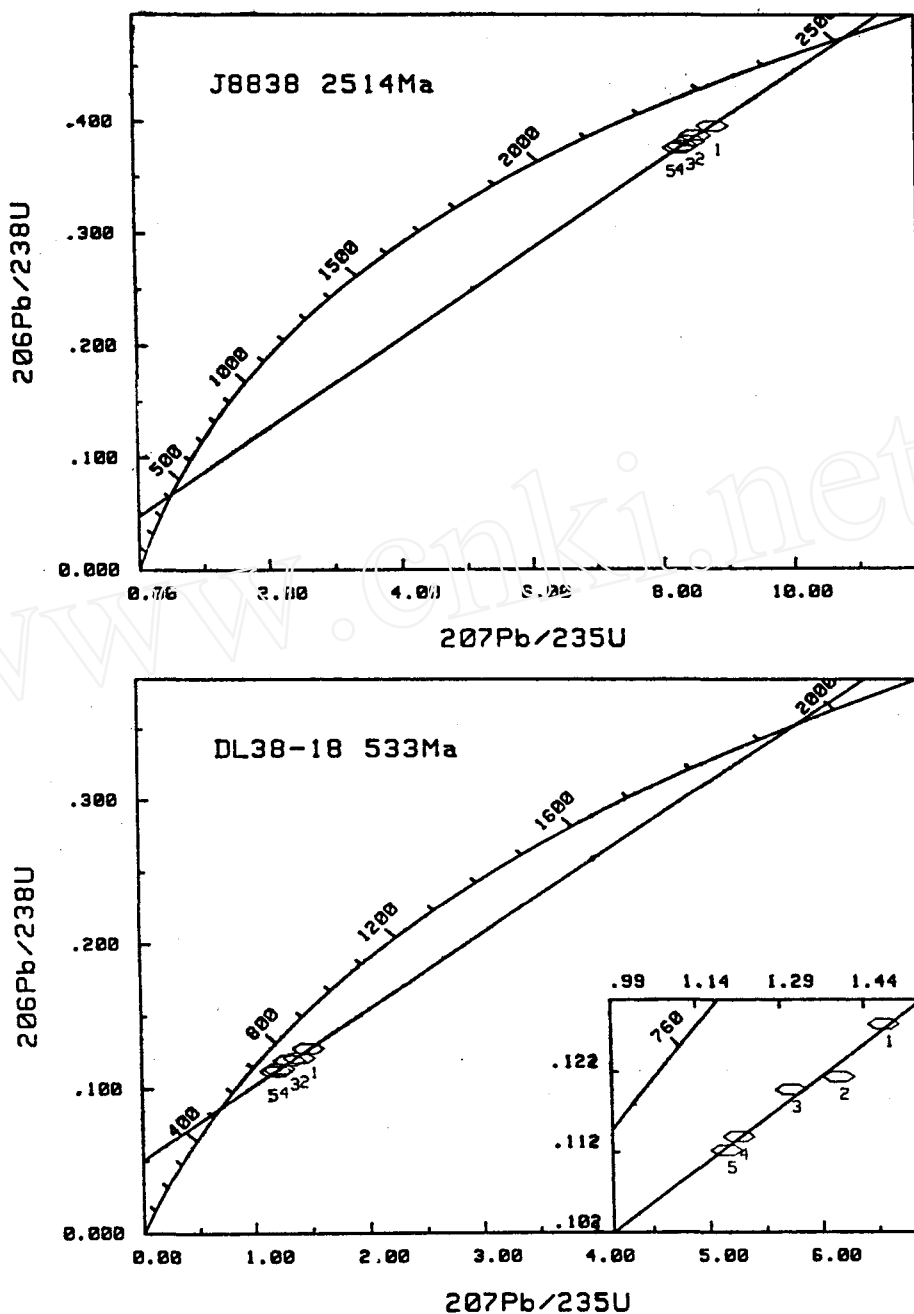


图5 锆石样品 DL38-18 的一致线年龄图解

参 考 文 献

- [1] HEWLETT PACKARD COMPANY, BASIC 3.0 Programming Techniques for HP9000 Series 200, Computers. P/N 98613-90010. U1184. Printed in the Federal Republic of Germany (1984)
- [2] York, Derek, Least Squares Fitting of A Straight Line With Correlated Errors (1968); *Earth and Planetary Science Letters*, No. 5, P320~324 (1969)
- [3] Ludwig, Kenneth R., Calculation of Uncertainties of U-Pb Isotope Data (1979); *Earth and Planetary Science Letters*, No. 46, P212~220 (1980)
- [4] Wetherill, G. W., Discordant Uranium-Lead Ages, *Trans. Amer. Geophys. Union*, No. 37, P320~326 (1956)

The Program of Data Treatment for U-Pb Concordant Age

Zhao Durmin

(Institute of Geology, Chinese Academy of Geological Sciences)

Received 20, Nov. 1989

Abstract

The data treatment for the determination of U-Pb concordant age of zircon was very complex and difficult. Just for this reason, the program of data treatment for U-Pb concordant age was edited with System III extended advanced BASIC language, and was available to HP200 series computers and HP9872 plotter. The function of the program involved modifying data on the screen with knob-cursor, least squares fitting of a straight line, calculating concordant age and its error, automatically plotting graph, data saving and access. It was fully proved that the program run flexibly and conveniently by using in a long period. The accurate reliable results and graph could be obtained fastly. Thus the level and efficiency of U-Pb data treatment was raised for a big step. Additionally, it was a successful trying to develop the function of HP200 series computers.