

¹⁴C年代测量数据的优化*

余家栋

(中国科学院海洋研究所)

提要 文中提出了要使¹⁴C年龄测量误差为极小的数据处理方法。它以测年误差公式根号内的表达式为目标函数,从仪器固定了的甄别阈窗口开始搜索,寻找最佳窗口,求得最小误差下的优化计数。这种方法对扩大年代测定范围是有好处的。需要指出的是它采用直接法优化,数值计算必须由计算机来完成。

一、引言

自1975年北京大学¹⁴C实验室建立液体闪烁法年代测量系统以来,至今已发展成为一种成熟可靠的实验技术。实验工作者一直在追求低本底高品质因数,力求降低测量的统计误差和扩大年代测定范围。目前要想从硬件上下功夫同时把这两个指标再提高一步已相当困难,是否在数据处理的方法上利用现代的计算技术另拓新径,倒可以一试。

测量系统的甄别阈一般在调好以后是不准动的。甄别阈要调得使糖碳计数下品质因数为极大。然后把该窗口固定下来,各种样品计数都按此窗口测量。优化处理方法的思路突破了传统的规定,它认为应当随样品年老的程度,让窗口作适当收缩,即以误差公式根号内的表达式为目标函数,用数值计算方法求得在最佳窗口下把测量值经过处理的样品计数值,从而得到最小误差下的年龄。最佳窗口是从硬件固定的窗口开始由软件进行进退法一维搜索⁽¹⁾得到的。对于年轻样品,最佳窗口就是仪器的甄别阈;对于年老样品,则应当是小一些。

二、优化原理

¹⁴C测年公式是:

$$Y = 8267 \operatorname{Ln} \frac{(N_s - N_b)G_t}{1.362(N_t - N_b)G_s} \quad (1)$$

式中 G_t , G_s 是样品糖碳的克重, N_t , N_s , N_b 是样品糖碳本底三者窗口下测量到的计数值(cpm), 不难算得,公式(1)对能谱窗口座标的导数 $dy/dx = 0$ 的必要条件是:

$$\begin{aligned} & (N_s - N_b)/(N_t - N_b) \\ & = d(N_s - N_b)/d(N_t - N_b) \end{aligned} \quad (2)$$

不妨把座标 X 分为0—255道,样品和糖碳的净计数作为 X 的函数可用近似模型

$$N_t(X) - N_b(X) = A_t X \exp(-X/X_m) \quad (3)$$

$$N_s(X) - N_b(X) = A_s X \exp(-X/X_m) \quad (4)$$

式中, A_t , A_s 为能谱高度, X_m 是能谱峰的 X 座标,它对于样品和糖碳应当是一样的。 X 的定义域在仪器设定好了的下阈 X_a 和上阈 X_b 之间。由此求得(2)式有

$$(N_s - N_b)/(N_t - N_b) = A_s/A_t \quad (5)$$

代入(1)式的结果表明样品年龄只与它的能谱的相对高度有关,窗口大小仅仅影响误差。

由公式(1)的误差传递公式可以得到年

* 作者谨向北京大学陈铁梅老师致以谢意。

代误差:

$$Y E = 8267 \sqrt{\frac{(N_s + N_b)}{(N_s - N_b)^2 T} + \frac{(N_t + N_b)}{(N_t - N_b)^2 T}} \quad (6)$$

式中的 T 为测量时间。对误差公式 (6) 根号中的第一项作一次近似估算是有意义的。考虑到测量系统本底较低 $N_b \ll N_s$, 并且存在一个常数 N_0 , 它是设想的系统效率为 100% 时的糖碳计数 (5ml 糖碳苯样约为 50cpm), 定义 E 为 % 效率, $Q = E^2/N_b$ 为系统品质因数, 那末

$$\frac{N_s + N_b}{T(N_s - N_b)^2} \approx \frac{1}{T N_0} \left[\frac{100}{E} + \frac{20000}{N_0 Q} \left(1 + \frac{200 E}{N_0 Q} \right) \right]$$

要使上式尽量小的办法, 一是延长测量时间 T ; 二是适当调整测量系统的工作状态, 兼顾效率 E 和本底 N_b , 使 E 、 Q 值代入上式方括号中为极小。举例来说, $E = 97$, $Q = 406$, 方括号内值约为 3, 若 $E = 70$, $Q = 1200$, 则方括号内值约为 1.8, 这说明误差对于 Q 值的敏感甚于效率 E 。当测量系统不带计算机数据处理时, 无法按照最小误差的原则事前调好仪器的最佳窗口, 传统的 ^{14}C 测量只能认定品质因数 Q 为极大时的甄别阈就是最佳窗口的办法, 是因为数据处理人工计算的条件限制了它。如果说年轻样品的误差, 由于根号内第二项接近第一项, 用 Q 值为极大的窗口下得到的测年误差, 虽然不是最优, 但基本接近的话; 那末对于年老样品而言, 由于根号内第二项的贡献超过第一项对误差的贡献, 为了使测年误差为极小 (亦即为了扩大测年范围), 必须采用微型计算机技术, 用直接法优化从 Q 值为极大时测得的数据, 使测量结果的统计误差为极小。

基于上述想法, 样品年龄与糖碳样品能谱峰的相对高度有关, 统计误差与所选的窗口大小有关, 那末只要改变一下测量方法, 用计算机数据采集装置测量固定窗口下的能谱, 算出年龄, 并以 (6) 式根号内的表达式为目标函数, 算出固定窗口下的初值, 按能谱道址的两侧用进退法向内作一维搜索直至达到预定的精

度, 得到最佳窗口下的误差。这样一来, 不但得到了满意的结果, 而且把过去手工计算的操作也归到计算机里去了。现在所剩的问题是如何给出一个数据采集处理系统。

三、数据采集接口

数据采集系统的硬件关键在于解决测试部分和计算机部分之间的接口。接口框图如图 1。

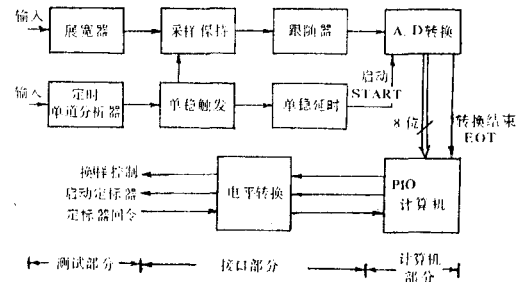


图 1 接口电路框图

Fig. 1 Interface circuits schematic diagram

本接口是一种低计数率随机脉冲幅度采样电路。由液体闪烁计数器调试在低本底高品质因数状态下得到的计数脉冲输出, 经过展宽器的整形, 变成了脉冲幅度保持不变而脉宽为 $0.5\mu\text{s}$ 固定的波形。只要此脉冲的幅度落在规定的窗口之内, 与此同时, 定时单道分析器一定会输出一个相应的脉冲使单稳电路翻转, 它的两路输出其中一路产生 $100\mu\text{s}$ 宽的负极性选通门控脉冲, 使 CA3080 集成电路对同时到达的计数脉冲的幅度作采样保持 $100\mu\text{s}$, 经绝缘栅场效应晶体管 3D01 构成的跟随器作用到 0809 芯片的 A/D 转换器上, 保证 0809 有足够的转换时间完成 A/D 转换。另一路单稳输出作了 μs 的延时后, 去启动 0809 的 start 引脚, 开始 A/D 转换。由于程序已在测量的时间内处于开中断状态, 一旦转换完成, A/D 转换器发出 EOT 信号, 计算机立即接收 0809 产生的 8 位数字信号作为内存地址, 使该单元的内容增 1, 即所谓中断方式采样, 在外部定时器控制的时间内, 逐个脉冲累计, 逐个脉冲分析它的高度, 实现能谱的测量。上述过程相当于 0—255 道能谱

分析,测量的死时间取决于0809的转换时间100 μ s。实测表明,它对低计数率的 ^{14}C 测量几乎没有影响。外部定时时间到后,系统从采样转向处理。

四、优化处理

数据采集处理系统的另一个关键是要设计出目的程序可执行。先列出程序框图以简化说明。程序框图见图2。

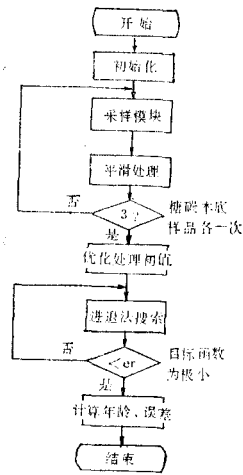


图2 程序框图

Fig. 2 Program frame diagram

对照着框图,对每一模块的功能说明如下。

1. 初始化 清内存数据区。输入必要的测量参数,如糖碳样品的重量,一批处理的样品个数。

2. 采样模块 启动定标器。开中断。等候每个随机脉冲的EOT信号,响应中断并调用一次中断服务子程序,作一次谱的某个道址增1的操作,查询外部定时器是否定时时间到?(如100分钟)到则关中断,移动内存地址指针,重复上述采样过程10次(共1000分钟),得到一组 10×256 个字节的谱记录。 X^2 (KAI方)检验,必要时发出补测告警。

3. 平滑处理 对经过 X^2 检验的完好谱记录,套用5点3次平滑公式,求得供计算的平滑谱,对糖碳、本底、样品各历经一次。

记作 $n_0(X)$, $n_1(X)$, $n_2(X)$, 其中 $X = 0, 255$ 。

4. 计算目标函数初值 硬件上已令下阈0.5V为道址0,上阈4.5V为道址255。计算初值

$$N_0 = \sum_{X=0}^{255} n_0(X); \quad N_1 = \sum_{X=1}^{255} n_1(x);$$

$$N_2 = \sum_{X=0}^{255} n_2(X);$$

$$F = \frac{N_0 + N_1}{(N_0 - N_1)^2} + \frac{N_2 + N_0}{(N_2 - N_0)^2}$$

并设定计算精度er和搜索指针sch拨到0。

5. 搜索循环 试探性地收缩上下阈各一步 $X_1 + 1$; $X_2 - 1$ 。

计算试探函数

$$N_0' = N_0 - n_0(X_1 + 1) - n_0(X_2 - 1)$$

$$N_1' = N_1 - n_1(X_1 + 1) - n_1(X_2 - 1)$$

$$N_2' = N_2 - n_2(X_1 + 1) - n_2(X_2 - 1)$$

$$F' = \frac{N_0' + N_1'}{(N_0' - N_1')^2} + \frac{N_2' + N_1'}{(N_2' - N_1')^2}$$

比较F和F'大小: (1) 若 $F' < F - er$, 则 $N_0 = N_0'$; $N_1 = N_1'$; $N_2 = N_2'$ 并移动搜索指针, 返回循环继续试探性收缩。(2) 若 $|F' - F| < er$, 则 $N_s = N_0'$; $N_b = N_1'$; $N_t = N_2'$; $YE = 8267 \sqrt{F'}$, 并计算年龄。退出搜索。(3) 若 $F + er > F' > F - er$, 则停止移动搜索指针, 仅在上阈侧再倒退一步后, 计算新值

$$N_0' = N_0' + n_0(X_2 + 1)$$

$$N_1' = N_1' + n_1(X_2 + 1)$$

$$N_2' = N_2' + n_2(X_2 + 1)$$

$$F' = \frac{(N_0' + N_1')}{(N_0' - N_1')^2} + \frac{N_2' + N_1'}{(N_2' - N_1')^2}$$

并比较F'和F再作出判决。

6. 结果计算 以退出搜索循环时的新的上下阈值为最佳窗口, 求得年龄及其误差。

五、结 语

本文提出的数据优化原理及其实现方法,

既提高了测量精度,又方便了实验工作者。如果经费许可,给系统配上象 Apple II + 之类的微机,利用萤屏图形实时显示采样过程的谱变化,也许还能灵活地掌握测量时间,提高系统的利用率。对谱的进一步研究,还可能分析

出一些有用的结果来。

参 考 文 献

- [1] 邓乃扬等著,1982。无约束最优化计算方法。科学出版社,第15页。

ON OPTIMIZATION OF MEASURING DATA OF ^{14}C AGE

Yu Jiadong

(*Institute of Oceanology, Academia Sinica*)

Abstract

This paper presents an optimum processing method for the measuring data of ^{14}C age. A whole expression in square root of age-error formula has come into use as a destination function. The computer program automatically searches the upper-down thresholds called window, fixed by the instrument, then looks for an optimum window defined as a minimum error, and finally calculates the values of results. Extending the range of ^{14}C age measurement, the method is useful for some older samples. It's necessary to point out that the method is a direct optimization and must be executed by a computer.