

ИЗМЕРЕНИЕ И АППРОКСИМАЦИЯ ВОЗРАСТНЫХ СПЕКТРОВ ГОРНЫХ ПОРОД И МИНЕРАЛОВ ПРИ $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ ДАТИРОВАНИИ

Д.В. Алексеев^{1,2}, А.В. Травин^{1,2}

¹Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, 630090, Новосибирск, просп. Академика Коптюга, 3, Россия

²Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2, Россия

Показано, что при $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датировании возрастной спектр образца может быть существенно искажен за счет усреднения изотопного состава аргона по доле выделенного газа при измерениях. Предложены новые методы аппроксимации возрастных спектров, обеспечивающие подавление данных искажений. Эффективность применения представленных методов аппроксимации показана на экспериментальном примере. Предложен новый метод измерения возрастных спектров с высоким разрешением по доле выделенного газа. Метод измерений основан на накоплении экспериментальных данных и позволяет по мере необходимости уточнять возрастной спектр или его отдельные участки. Применимость и эффективность рассмотренного метода показана на экспериментальном примере. Представленный метод может быть использован не только для измерения возрастных спектров при $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датировании, но и для измерения других характеристик изотопных систем образцов горных пород и минералов при поэтапном выделении анализируемого вещества.

$^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датирование, возрастной спектр, обратная задача, интегральное уравнение Фредгольма.

MEASUREMENT AND APPROXIMATION OF THE AGE SPECTRA OF ROCKS AND MINERALS DURING $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ DATING

D.V. Alekseev and A.V. Travin

During $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ dating, the age spectrum of the sample can be seriously distorted because of the averaging of its Ar isotope composition over the portion of the released gas. New methods of age spectrum approximation with suppression of distortions have been elaborated. The efficiency of these methods is experimentally demonstrated. A new method for measurement of age spectra with high resolution by the portion of the released gas is proposed. The method is based on the experimental data and permits refining of the age spectrum or its fragments. The applicability and efficiency of this method are also shown experimentally. The proposed method can be used not only to measure the age spectra during $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ dating but also to measure other isotope characteristics of the rock and mineral samples during the stepwise separation of the analyte.

$^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ dating, age spectrum, inverse problem, Fredholm integral equation

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ метод датирования является одним из самых востребованных методов определения возраста горных пород и минералов. Он привлекателен тем, что позволяет не только определять возраст образцов, но и восстанавливать их термическую историю [Dickin, 2005; Bogard, Garrison, 2008; Nyodo, 2008; Lee, 2009]. Данный метод используется во многих лабораториях мира [Renne et al., 2012; Shi et al., 2014; Gutierrez-Alonso et al., 2015; McDonald et al., 2016]. В России $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датирование выполняется в двух научных центрах: ЦКП многоэлементных и изотопных исследований СО РАН (Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск) и ЦКП «Геодинамика и геохронология» (Институт земной коры СО РАН, Иркутск) [Ivanov et al., 2015].

При $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датировании выделение аргона из навески образца выполняют поэтапно путем ее ступенчатого нагрева. Одной из основных характеристик образца является его возрастной спектр — зависимость значения возраста (вычисленного по изотопному составу аргона, выделенного из образца на данном этапе дегазации) от общей доли выделенного ^{39}Ar . Возрастной спектр представляют в виде ступенчатой функции, каждая ступень которой соответствует этапу дегазации образца [Lectures..., 1979; Dickin, 2005].

Под истинным возрастным спектром следует понимать идеализированный возрастной спектр, полученный по бесконечно большому количеству ступеней при абсолютной точности измерений. Поскольку количество ступеней выделения аргона из образца всегда ограничено, на каждом этапе дегаза-

Рис. 1. Возрастной спектр клинопироксена и модель его истинного возрастного спектра.

Пояснения см. в тексте.

ции, фактически, измеряется изотопный состав аргона, усредненный по доле выделенного газа. Значения возрастов ступеней вычисляются по усредненным изотопным отношениям. Таким образом, возрастной спектр может быть искажен за счет усреднения изотопного состава аргона при измерениях. Насколько могут быть велики данные искажения, показывает следующий пример.

На рис. 1 сплошной черной линией клинопироксена, в котором калий в виде примеси содержится в кристаллической решетке (образец предоставлен В.П. Афанасьевым, измерения выполнялись в ЦКП многоэлементных и изотопных исследований СО РАН). Усреднение, имевшее место при измерении возрастного спектра клинопироксена, преобразует возрастной спектр, обозначенный штриховой линией, в возрастной спектр, совпадающий в пределах погрешности с экспериментальным возрастным спектром клинопироксена. Иными словами, возрастной спектр, обозначенный штриховой линией, — модель истинного возрастного спектра клинопироксена. Сравнивая представленные возрастные спектры, нетрудно прийти к выводу, что искажения, обусловленные усреднением, могут быть весьма существенны и приводить к потере информативности возрастного спектра. Данный пример является далеко не единственным, возрастные спектры, аналогичные рассмотренному, можно найти, например, в работах [Vincenzo et al., 2004; Negro et al., 2008; Гибшер и др., 2012].

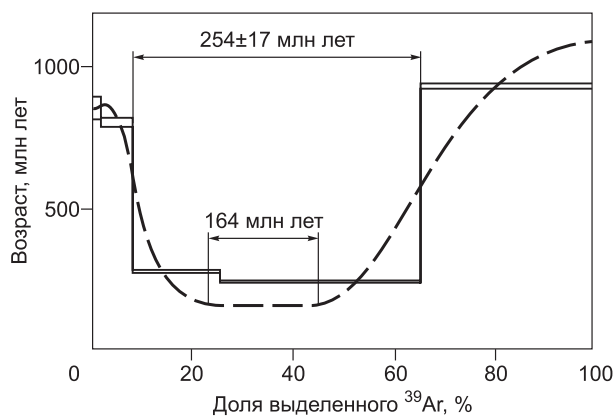
Чтобы добиться подавления искажений, связанных с усреднением, необходимо увеличивать количество ступеней дегазации, т. е. повышать разрешение по доле выделенного ^{39}Ar . Однако на практике детальное измерение возрастных спектров во многих случаях затруднительно по ряду технических причин. Основная трудность заключается в отсутствии надежного контроля над количеством газа, выделяемого на той или иной ступени дегазации. Например, амфиболы имеют узкий пик выделения аргона по температуре. Кроме того, следует отметить, что увеличение количества ступеней дегазации будет приводить к уменьшению количества газа на каждой из них и, как следствие, достаточно быстрому росту погрешности измерений. Как показывает практика, увеличение стандартной массы навесок образцов крайне нежелательно по ряду причин, например, из-за возникновения риска повреждения коллекторов масс-спектрометра; ускорения износа системы очистки газа; неоправданного увеличения времени измерений при датировании образцов, имеющих платообразный возрастной спектр (очевидно, что оценить характер возрастного спектра заранее весьма затруднительно) и т. д. Типичная масса навески образца, принятая на данный момент, подобрана в результате длительной практики датирования и является оптимальной.

Достоверность и информативность $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датирования напрямую зависит от качества измерения возрастных спектров. В современной литературе проблемы, связанные с искажением возрастных спектров за счет усреднения изотопного состава аргона при измерениях, не обсуждались (см. все приведенные выше ссылки). Настоящая работа посвящена разработке нового метода измерения возрастных спектров горных пород и минералов при $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датировании, обеспечивающего высокое разрешение по доле выделенного ^{39}Ar , а также разработке новых методов аппроксимации возрастных спектров, обеспечивающих подавление описанных искажений.

АППРОКСИМАЦИЯ ВОЗРАСТНЫХ СПЕКТРОВ

Перед тем, как приступить к непосредственному описанию предлагаемого метода измерений, необходимо обсудить способ аппроксимации возрастных спектров. Чтобы описанные выше искажения были минимальны, способ аппроксимации возрастного спектра должен быть основан на восстановлении истинной зависимости изотопного отношения $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$ от доли выделенного ^{39}Ar , где $^{40}\text{Ar}^*$ — радиогенный ^{40}Ar . Рассмотрим возможности такой аппроксимации.

Аппроксимация возрастного спектра по зависимости $N(\tilde{N})$. Для большей наглядности будем считать, что измерения выполняются с абсолютной точностью. Введем следующие обозначения: N_i — общее количество $^{40}\text{Ar}^*$, выделенного из образца к моменту окончания i -й ступени дегазации; N — общее количество $^{40}\text{Ar}^*$, выделенного из образца в текущий момент времени; \tilde{N}_i — общее количество ^{39}Ar , выделенного из образца к моменту окончания i -й ступени дегазации; \tilde{N} — общее количество ^{39}Ar , выделенного из образца в текущий момент времени.



Предлагаемый метод аппроксимации заключается в следующем. Результаты ступенчатой дегазации образца представляют в виде последовательности точек с координатами (\tilde{N}_i, N_i) . Данная последовательность точек, представляющая монотонно возрастающую зависимость $N(\tilde{N})$, аппроксимируется гладкой непрерывной функцией $N(\tilde{N})^{(apr)}$. Далее вычисляется функция $I(\tilde{N})^{(apr)}$, аппроксимирующая истинную зависимость изотопного отношения $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$ от \tilde{N} :

$$I(\tilde{N})^{(apr)} = \frac{dN(\tilde{N})^{(apr)}}{d\tilde{N}}. \quad (1)$$

Затем, по полученной функции $I(\tilde{N})^{(apr)}$ вычисляется возрастной спектр.

Независимо от количества ступеней дегазации и распределения газа между ними, точки с координатами (\tilde{N}_i, N_i) принадлежат истинной зависимости $N(\tilde{N})$. Таким образом, в предлагаемом методе аппроксимации в качестве исходной экспериментальной зависимости, по которой вычисляется возрастной спектр, выбрана зависимость, не искажаемая в результате усреднения — $N(\tilde{N})$. При традиционной аппроксимации в качестве исходной экспериментальной зависимости фактически выбрана измеряемая зависимость изотопного отношения $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$ от доли выделенного ^{39}Ar , т. е. зависимость в общем случае искаженная в результате усреднения. В предлагаемом методе аппроксимации зависимость $N(\tilde{N})$ аппроксимируется гладкой непрерывной функцией, что соответствует общим физическим соображениям. В традиционном способе исходная экспериментальная зависимость аппроксимируется ступенчатой функцией. Указанные особенности предложенного метода аппроксимации обеспечивают подавление искажений, обусловленных усреднением.

Рассмотрим пример применения предложенного метода. На рис. 2, а, б представлены возрастные спектры $F(n)^{(1)}$, $F(n)^{(2)}$ и $F(n)^{(3)}$, где n — доля выделенного ^{39}Ar , F — значение возраста. Возрастные спектры $F(n)^{(1)}$ и $F(n)^{(2)}$ измерены по двум разным навескам одного и того же образца долерита и аппроксимированы традиционным способом (образец предоставил Ф. Делпомдор, измерения выполнялись в ЦКП многоэлементных и изотопных исследований СО РАН, исходные экспериментальные данные приведены в работе [Delpomdor et al., 2013]). Оба спектра, по сути, отличаются лишь количеством ступеней дегазации. Возрастной спектр $F(n)^{(1)}$ будем считать эталонным, поскольку он измерен более подробно по сравнению с возрастным спектром $F(n)^{(2)}$, погрешности по возрасту обоих спектров примерно одинаковы (~8 млн лет). Возрастной спектр $F(n)^{(3)}$ построен по данным, полученным при измерении возрастного спектра $F(n)^{(2)}$ с помощью предложенного способа аппроксимации.

Из рисунков 2, а, б видно, что возрастной спектр $F(n)^{(3)}$, полученный с помощью предложенного метода аппроксимации, лучше согласуется с эталонным спектром $F(n)^{(1)}$ по сравнению со спектром $F(n)^{(2)}$, полученным с помощью традиционного метода аппроксимации. Лучше всего это видно на участке от 60 до 100 % по доле выделенного ^{39}Ar . Таким образом, предложенный способ аппроксимации обеспечивает достаточно эффективное подавление искажений, обусловленных усреднением.

Аппроксимация возрастного спектра путем решения интегрального уравнения. Пусть g_i — изотопное отношение $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$, измеренное на i -й ступени дегазации образца; f_i — полуширина i -й ступени по оси n ; n_i — центр i -й ступени на оси n (рис. 3). Последовательность точек с координатами (n_i, g_i) представляет измеряемую зависимость изотопного отношения $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$ от доли выделенного ^{39}Ar ; гладкую непрерывную функцию, аппроксимирующую данную зависимость, обозначим $g(n)$. Последовательность точек с координатами (n_i, f_i) представляет зависимость полуширины ступени дегазации от доли выделенного ^{39}Ar ; гладкую непрерывную функцию, аппроксимирующую данную зависимость, обозначим $f(n)$.

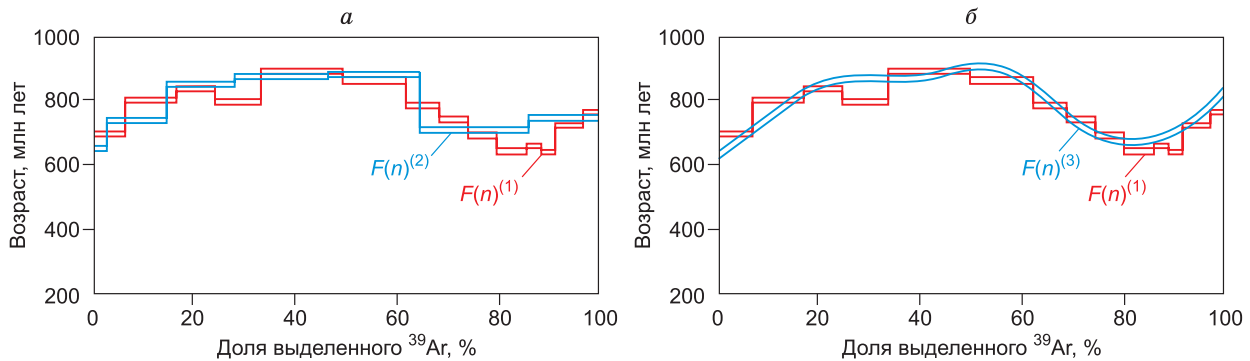
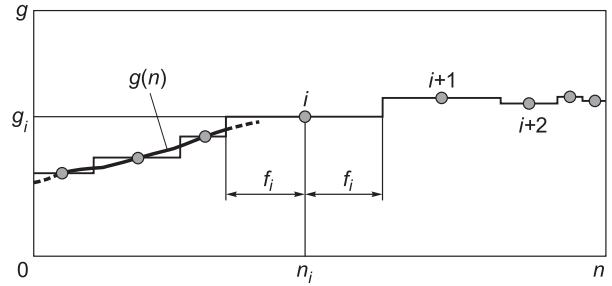


Рис. 2. а — возрастные спектры долерита $F(n)^{(1)}$ и $F(n)^{(2)}$, б — возрастные спектры долерита $F(n)^{(1)}$ и $F(n)^{(3)}$.

Рис. 3. Измеряемая зависимость изотопного отношения $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$ от доли выделенного ^{39}Ar .

Пояснения см. в тексте.



В данном случае функция, аппроксимирующая истинную зависимость изотопного отношения $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$ от доли выделенного ^{39}Ar — $I(n)$, связана с $g(n)$ уравнением Фредгольма первого рода:

$$g(n) = \int_{-\infty}^{\infty} V(n, n') \cdot I(n') dn', \quad (2)$$

где $V(n, n') = \left[\frac{\eta(n' - n + f(n)) - \eta(n' - n - f(n))}{2f(n)} \right]$ — прямоугольное окно усреднения переменной ширины, $\eta(x)$ — функция Хэвисайда [Алексеев, Травин, 2015].

Суть предлагаемого метода аппроксимации заключается в следующем. По экспериментальным данным, полученным при дегазации образца, вычисляют функции $g(n)$ и $f(n)$. Путем решения интегрального уравнения (2) вычисляется функция $I(n)$, по полученной функции вычисляется возрастной спектр. Подавление искажений, обусловленных усреднением, обеспечивается восстановлением истинной зависимости изотопного отношения $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$ от доли выделенного ^{39}Ar при решении интегрального уравнения (2).

Обратные некорректные задачи находят приложения во многих разделах естествознания (физике, геофизике, медицине, измерительной технике и т. д.) [Кабанихин, 2009]. Решение интегрального уравнения Фредгольма первого рода представляет собой хорошо известную обратную некорректную задачу [Бахвалов и др., 2008; Кабанихин, 2009]. В данном случае некорректность задачи означает частичную утерю информации об истинной зависимости $I(n)$ в результате ее усреднения при измерениях. Для решения интегрального уравнения Фредгольма первого рода существуют специальные методы, включающие его регуляризацию [Васильева, Тихонов, 1989; Вержбицкий, 2002; Бахвалов и др., 2008; Кабанихин, 2009]. Регуляризация предполагает введение тех или иных предположений о решении, наиболее естественных и очевидных. Чаще всего регуляризация предполагает поиск наиболее регулярного, т. е. плавного решения.

В рассматриваемом случае ядро интегрального уравнения (2) — прямоугольное окно усреднения переменной ширины. Строго прямоугольная форма окна усреднения приводит к тому, что непосредственное численное решение данного интегрального уравнения, включающее его регуляризацию, оказывается затруднительным — решение во многих случаях неустойчиво (небольшая погрешность в исходных данных приводит к возникновению существенной погрешности в решении).

В связи с этим для решения интегрального уравнения Фредгольма первого рода был создан специальный численный алгоритм, суть которого заключается в следующем. Пусть $i(n)_l$ — функциональный базис, индекс l указывает номер функции, входящей в данный функциональный базис; F_s — система линейных функционалов, индекс s указывает номер функционала; i_l^0 — коэффициент разложения функции $I(n)$ в ряд Фурье по функциональному базису $i(n)_l$, индекс l указывает номер коэффициента [Вулих, 1958; Лебедев, 1994; Баскаков и др., 2000]. Заменяя в уравнении (2) функцию $I(n)$ на сумму первых $(N+1)$ членов ее разложения в ряд Фурье по функциональному базису $i(n)_l$ и действуя на обе части полученного равенства линейным функционалом F_s , а также, изменяя значения индекса s , получим следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$F_s(g(n)) = \sum_{l=0}^N i_l^0 \cdot F_s \left(\int_{-\infty}^{+\infty} V(n, n') i(n')_l dn' \right). \quad (3)$$

Решая полученную систему уравнений относительно i_l^0 , вычислим значения первых $(N+1)$ коэффициентов разложения функции $I(n)$ в ряд Фурье. Суммируя данный ряд, вычислим искомую функцию $I(n)$. Переход от интегрального уравнения (2) к системе линейных алгебраических уравнений (3) значительно упрощает регуляризацию решения [Алексеев, 2015]. Регуляризация системы уравнений (3) выполняется одним из существующих методов, в дальнейшем при вычислениях использовалась регуляри-

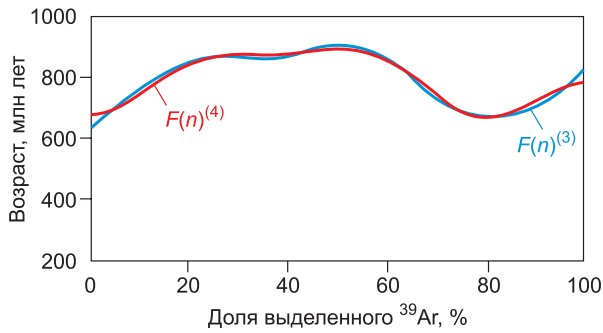


Рис. 4. Возрастные спектры $F(n)^{(3)}$ и $F(n)^{(4)}$.

зация, описанная в работе [Алексеев, Травин, 2015]. Предложенный алгоритм успешно протестирован на ряде численных примеров и демонстрирует высокую устойчивость решения.

В некоторых случаях метод аппроксимации, основанный на решении интегрального уравнения (2), может быть несколько точнее метода, основанного на построении зависимости $N(\tilde{N})$. Это связано с тем, что при аппроксимации по зависимости $N(\tilde{N})$, возрастной спектр вычисляется по количеству ^{40}Ar и ^{39}Ar ; при аппроксимации путем решения интегрального уравнения (2) возрастной спектр вычисляется по количеству ^{39}Ar и изотопным отношениям $^{40}\text{Ar}^*/^{39}\text{Ar}$. Изотопные отношения измеряются точнее количества того или иного изотопа.

Пользуясь экспериментальным примером, рассмотренным выше, сравним предложенные методы аппроксимации. На рисунке 4 представлены возрастные спектры $F(n)^{(3)}$ и $F(n)^{(4)}$. Возрастной спектр $F(n)^{(3)}$ обсуждался ранее, данный возрастной спектр вычислен с помощью метода, основанного на построении зависимости $N(\tilde{N})$; возрастной спектр $F(n)^{(4)}$ построен по тем же экспериментальным данным, что и возрастной спектр $F(n)^{(3)}$ путем решения интегрального уравнения (2). Погрешности по возрасту в данном случае отличаются несущественно. Представленные возрастные спектры хорошо согласуются. Таким образом, предложенные методы аппроксимации дают аналогичный результат и обеспечивают достаточно эффективное подавление искажений, обусловленных усреднением.

ИЗМЕРЕНИЕ ВОЗРАСТНЫХ СПЕКТРОВ

Измерение возрастных спектров путем построения зависимости $N(\tilde{N})$. Предлагаемый метод измерений представляет собой обобщение описанных выше методов аппроксимации и основан на следующем предположении: в идеализированном случае, если все навески одного и того же образца содержат одинаковое количество аргона и являются представительными, то зависимости $N(\tilde{N})$, полученные по разным навескам этого образца, совпадают. Далее, на экспериментальном примере будет показано, что, по крайней мере, для некоторых образцов данное предположение справедливо. Кроме того, отметим, если зависимости $N(\tilde{N})$, полученные по разным навескам одного и того же образца, отличаются, то разным навескам соответствуют разные истинные возрастные спектры (см. формулу (1)), что противоречит повторяемости результатов измерений.

На практике навески образца могут отличаться содержанием аргона, J -фактором, характеризующим интегральный поток нейтронов при облучении в реакторе, и т. д. В результате этого зависимости $N(\tilde{N})$, полученные по разным навескам одного и того же образца, должны совпадать с точностью до растяжения (сжатия) вдоль координатных осей, при этом коэффициент растяжения вдоль координаты N может отличаться от коэффициента растяжения вдоль координаты \tilde{N} .

Пусть зависимость $N(\tilde{N})$, полученная по одной из навесок, представлена множеством экспериментальных точек с координатами (\tilde{N}_i, N_i) , где индекс i указывает номер точки. Координаты N_i и \tilde{N}_i вычисляются следующим образом:

$$N_i = \sum_{j=1}^i \Delta_j N, \quad (4)$$

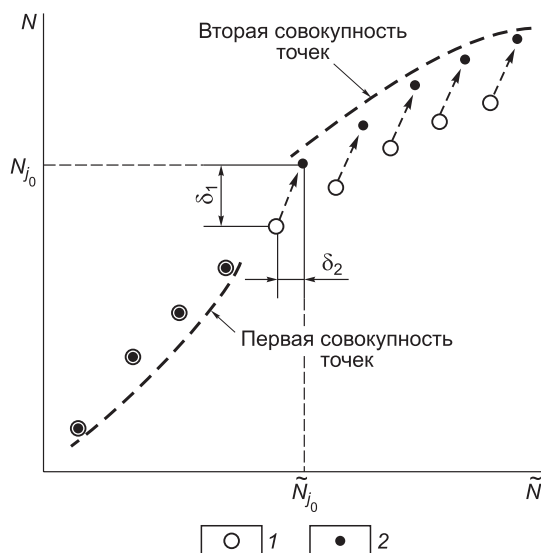
$$\tilde{N}_i = \sum_{j=1}^i \Delta_j \tilde{N}, \quad (5)$$

где $\Delta_j N$ — количество $^{40}\text{Ar}^*$, выделенного из навески образца на j -й ступени дегазации; $\Delta_j \tilde{N}$ — количество ^{39}Ar , выделенного из навески образца на j -й ступени дегазации. Предположим, что на ступени j_0 под действием каких-либо случайных причин (например, сбой системы очистки выделенного газа, скачок напряжения питания и т.д.) $\Delta_{j_0} N$ и $\Delta_{j_0} \tilde{N}$ измерены некорректно, причем на всех остальных ступенях выделения $\Delta_j N$ и $\Delta_j \tilde{N}$ измерены корректно. В этом случае все точки зависимости $N(\tilde{N})$, начиная с точки $(\tilde{N}_{j_0}, N_{j_0})$, будут смещены вдоль координаты N на некоторое расстояние δ_1 и вдоль координаты \tilde{N} на некоторое расстояние δ_2 (рис. 5). Это обусловлено тем, что координаты (\tilde{N}_i, N_i) определяются как суммы соответствующих приращений $\Delta_j N$ и $\Delta_j \tilde{N}$, предшествующих данной точке. Чтобы в нашем случае добиться подавления искажения зависимости $N(\tilde{N})$, множество точек (\tilde{N}_i, N_i) следует разбить на

Рис. 5. Искажение зависимости $N(\tilde{N})$.

1 — точки с координатами (\tilde{N}_i, N_i) в случае, если все приращения $\Delta_j N$ и $\Delta_j \tilde{N}$ измерены корректно; 2 — точки с координатами (N_i, N_i) в случае, если приращения $\Delta_j N$ и $\Delta_j \tilde{N}$ измерены некорректно.

две совокупности: в первую включить точки, порядковые номера которых меньше j_0 , во вторую — точки, порядковые номера которых больше j_0 , а также точку $(\tilde{N}_{j_0}, N_{j_0})$; далее необходимо переместить вторую совокупность точек вдоль осей N и \tilde{N} на расстояния δ_1 и δ_2 соответственно, сохраняя при этом постоянными расстояния между точками данной совокупности (см. рис. 5). Иными словами, вторую совокупность точек следует переместить так, чтобы зависимость $N(\tilde{N})$ совпала с зависимостями $N(\tilde{N})$, полученными по другим навескам того же образца (с точностью до растяжения вдоль координатных осей). Таким образом, зависимости $N(\tilde{N})$, полученные по разным навескам одного и того же образца, должны совпадать с точностью до следующих преобразований: первое преобразование — растяжение вдоль координатных осей; второе — перемещение вдоль координатных осей отдельных совокупностей точек, представляющих участки данных зависимостей.



Суть предлагаемого метода измерений заключается в следующем. Выполняется ступенчатая дегазация нескольких навесок одного и того же образца. При этом дегазация выполняется таким образом, чтобы ступени дегазации, соответствующие разным навескам, в основном имели разные границы по доле выделенного ^{39}Ag , исключение могут составлять лишь отдельные границы ступеней дегазации, проще говоря, дегазация разных навесок осуществляется разными долями по ^{39}Ag . В полученные экспериментальные данные вводятся необходимые поправки. Для каждой навески формируется зависимость $N(\tilde{N})^{(k)}$, где индекс k указывает номер навески.

С помощью двух указанных выше преобразований обеспечивается совпадение зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$. Первое преобразование позволяет учесть различие экспериментальных условий ступенчатой дегазации, второе позволяет добиться подавления искажений, обусловленных действием случайных факторов. При первом преобразовании необходимо добиться совпадения точек, отвечающих одинаковым долям выделенного ^{39}Ag , в частности, точек, отвечающих окончанию выделения аргона из данной навески. При втором преобразовании совокупность точек, представляющая участок зависимости $N(\tilde{N})^{(k)}$ и перемещаемая вдоль координатных осей, должна иметь достаточно большое количество точек, чтобы можно было утверждать, что она содержит информацию о форме некоторого участка зависимости $N(\tilde{N})^{(k)}$.

В представленной работе второе преобразование выполнялось следующим образом. Путем перебора всех возможных вариантов, организованного с помощью программного цикла, выбирается разбиение множеств точек зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ на совокупности точек, при котором их перемещение обеспечивает наибольшую согласованность зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$. В качестве количественной меры согласованности зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ используется значение модуля разности между функциями, аппроксимирующими данные зависимости (после первого преобразования, т. е. растяжения вдоль координатных осей), усредненное по \tilde{N} . При оценке совмещения зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ учитывается, что в дальнейшем удаляются резко отклоняющиеся точки. Совокупность точек, перемещаемая вдоль координатных осей, должна содержать не менее четырех точек. Совокупность, содержащая точку, лежащую в начале координат, не перемещается. Преобразование выполняется лишь в том случае, если позволяет улучшить совпадение зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ не менее чем в два раза. Далее выполняется необходимое перемещение выбранных совокупностей точек вдоль координатных осей. Алгоритм реализован в программе MathCAD.

Затем, множества точек зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ объединяются в одно множество, представляющее зависимость $N(\tilde{N})^{(gen)}$, характеризующую образец. Удаляются резко отклоняющиеся точки. Количество точек зависимости $N(\tilde{N})^{(gen)}$ возрастает за счет увеличения количества навесок образца.

Зависимость $N(\tilde{N})^{(gen)}$ нормируется вдоль координатных осей так, чтобы тангенс угла наклона прямой, соединяющей начало координат с последней точкой зависимости $N(\tilde{N})^{(gen)}$, был равен величине $J \cdot (N^{(0)} / \tilde{N}^{(0)})$, усредненной по всем навескам образца, где $N^{(0)}$ — общее количество $^{40}\text{Ag}^*$, выделенного из навески образца, $\tilde{N}^{(0)}$ — общее количество ^{39}Ag , выделенного из той же навески, J — J -фактор. Данная

нормировка позволяет добиться снижения погрешности, обусловленной погрешностью определения J -фактора. Далее, при вычислении возрастного спектра значение J , очевидно, полагается равным единице.

Зависимость $N(\tilde{N})^{(gen)}$ аппроксимируется гладкой непрерывной функцией $N(\tilde{N})^{(apr)}$. По формуле (1) вычисляется функция $I(\tilde{N})^{(apr)}$. По функции $I(\tilde{N})^{(apr)}$ вычисляется возрастной спектр.

Применимость предложенного метода измерений может быть проверена без привлечения других, независимых методов. Действительно, пусть $N(\tilde{N})_{(p)}^{(apr)}$ — функция, аппроксимирующая зависимость $N(\tilde{N})^{(gen)}$, вычисленная по результатам ступенчатой дегазации p навесок образца. Увеличивая количество навесок образца можно получить последовательность функций $N(\tilde{N})_{(p)}^{(apr)}$, каждая следующая функция которой получена по большему количеству навесок, чем предшествующая. Если предположение о совпадении зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$, полученных по различным навескам образца, справедливо (предложенный метод применим), то увеличение индекса p будет приводить лишь к уточнению функции $N(\tilde{N})_{(p)}^{(apr)}$. В этом случае последовательность $N(\tilde{N})_{(p)}^{(apr)}$ будет равномерно сходящейся — для любого значения \tilde{N} модуль разности $(N(\tilde{N})_{(p)}^{(apr)} - N(\tilde{N})_{(p-1)}^{(apr)})$ может быть сделан сколь угодно малым путем выбора достаточно большого значения индекса p . Последовательность $N(\tilde{N})_{(p)}^{(apr)}$ будет сходиться к истинной зависимости $N(\tilde{N})^{(gen)}$. В противном случае с увеличением значения p функции $N(\tilde{N})_{(p)}^{(apr)}$ будут лишь усложняться, не стремясь к некоторому пределу.

Пользуясь теми же экспериментальными данными, что и при рассмотрении методов аппроксимации, рассмотрим пример применения предложенного метода измерений. Итак, выполнена ступенчатая дегазация двух навесок долерита. В полученные экспериментальные данные введены стандартные поправки. На рисунке 6 представлены зависимости $N(\tilde{N})^{(k)}$, кружками обозначены точки зависимости $N(\tilde{N})^{(1)}$, треугольниками — точки зависимости $N(\tilde{N})^{(2)}$. Для наглядности качественного анализа предложенного метода измерений на рисунках погрешности не представлены. Кроме того, чтобы формы зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ были наиболее очевидны, в дальнейшем, перед графическим представлением выполнялся поворот данных зависимостей вокруг начала координат на один и тот же угол по направлению к оси \tilde{N} .

Проиллюстрируем выполнение алгоритма совмещения зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$. В первую очередь сравним формы зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$. Для этого путем растяжения данных зависимостей вдоль координатных осей совместим их точки, отвечающие окончанию выделения аргона (рис. 7). Между зависимостями $N(\tilde{N})^{(k)}$ имеется систематическое различие: точки зависимости $N(\tilde{N})^{(2)}$ в основном расположены ниже функции, аппроксимирующей $N(\tilde{N})^{(1)}$. Для согласования зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ требуется выполнение второго преобразования. В ходе выполнения алгоритма совмещения зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$ множество точек, представляющее $N(\tilde{N})^{(2)}$, было разбито на две совокупности точек. В первую совокупность включены первые две точки зависимости $N(\tilde{N})^{(2)}$, во вторую — все последующие точки данной зависимости. Зависимости $N(\tilde{N})^{(k)}$, полученные после перемещения второй совокупности точек, представлены на рис. 8, а.

Далее зависимости $N(\tilde{N})^{(k)}$ объединяются в зависимость $N(\tilde{N})^{(gen)}$, из нее удаляются резко отклоняющиеся точки (см. рис. 8, б). $N(\tilde{N})^{(gen)}$ аппроксимируется методом наименьших квадратов суммой полиномов Чебышева. По полученной функции вычисляется возрастной спектр (рис. 9, а). Погрешность по возрасту, так же как и в эталонном возрастном спектре $F(n)^{(1)}$, не превышает 9 млн лет.

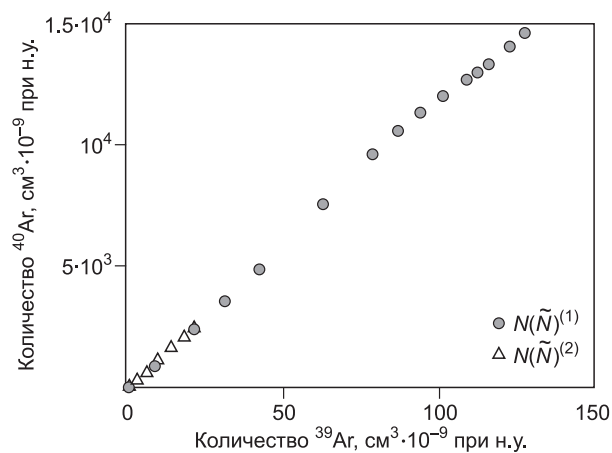


Рис. 6. Зависимости $N(\tilde{N})^{(1)}$ и $N(\tilde{N})^{(2)}$, построенные по экспериментальным данным, полученным при датировании образца долерита.

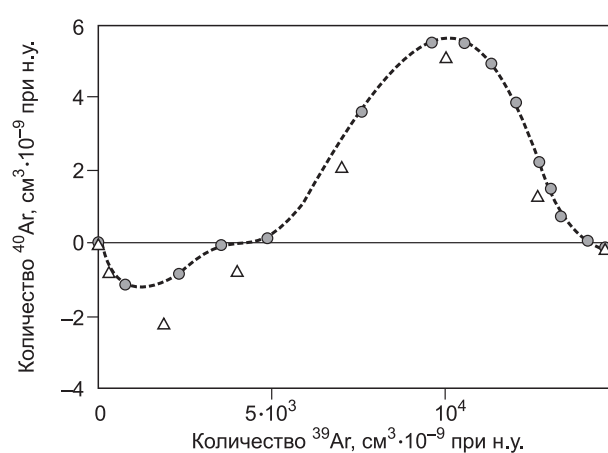


Рис. 7. Зависимости $N(\tilde{N})^{(1)}$ и $N(\tilde{N})^{(2)}$ после первого преобразования.

Усл. обозн. см. на рис. 6.

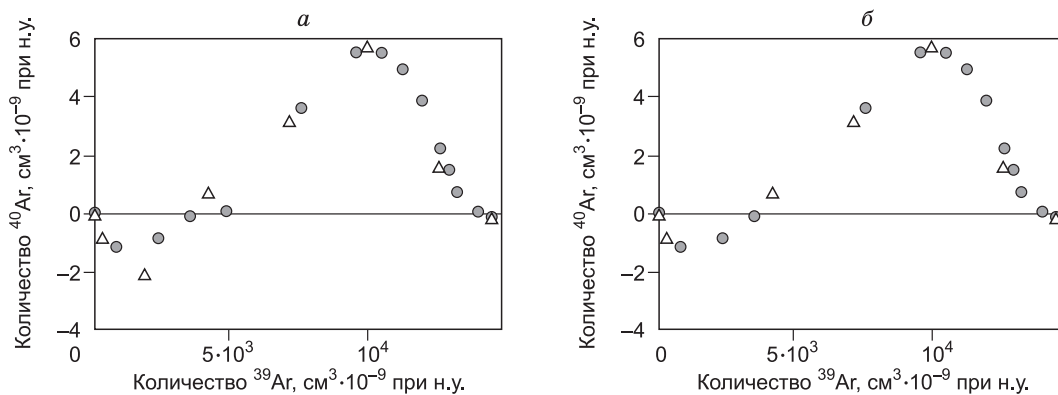


Рис. 8. *а* — зависимости $N(\tilde{N})^{(1)}$ и $N(\tilde{N})^{(2)}$ после первого и второго преобразований, *б* — зависимость $N(\tilde{N})^{(gen)}$ после удаления резко отклоняющихся точек.

Усл. обозн. см. на рис. 6.

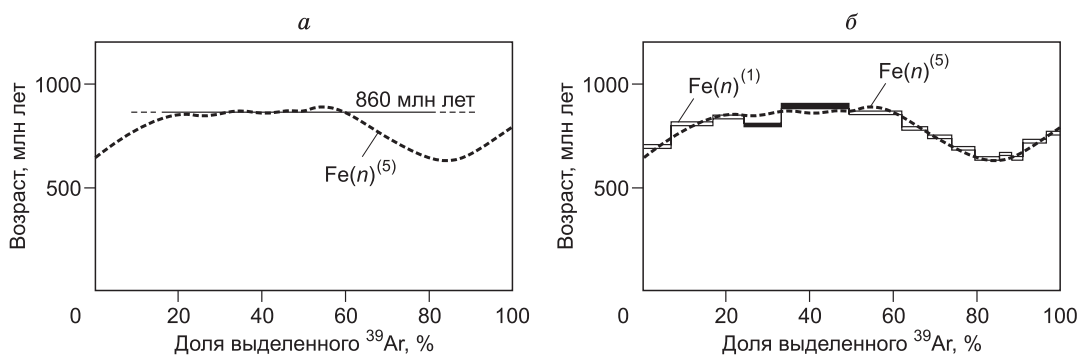


Рис. 9. *а* — возрастной спектр долерита $F(n)^{(5)}$, полученный с помощью предложенного метода измерений, *б* — возрастной спектр $F(n)^{(5)}$ и эталонный возрастной спектр долерита $F(n)^{(1)}$.

Зависимости $N(\tilde{N})^{(k)}$, полученные по разным навескам одного и того же образца долерита, достаточно хорошо совмещаются. Это дает основание утверждать, что предположение, лежащее в основе предложенного метода измерений, в рассмотренном случае выполняется. Как и следовало ожидать, возрастной спектр, построенный с помощью предложенного метода измерений $F(n)^{(5)}$, хорошо согласуется с эталонным возрастным спектром $F(n)^{(1)}$ (см. рис. 9, б). Поскольку количество ступеней дегазации первой навески долерита значительно больше количества ступеней дегазации второй навески долерита, экспериментальные данные, полученные по второй навеске, приводят лишь к уточнению возрастного спектра. Отличие возрастных спектров $F(n)^{(1)}$ и $F(n)^{(5)}$ обусловлено удалением резко отклоняющихся точек (см. рис. 8).

Метод измерений, основанный на решении интегрального уравнения. Другой вариант предлагаемого метода измерений заключается в следующем. Выполняется ступенчатая дегазация нескольких навесок образца. При этом при дегазации каждой следующей навески изменяют зависимость $f(n)$. В полученные данные вводятся необходимые поправки. После фильтрации экспериментальных данных, основанной на совмещении зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$, для каждой навески образца составляется система уравнений (3). Предположение о совпадении зависимостей $N(\tilde{N})^{(k)}$, полученных по разным навескам одного и того же образца, эквивалентно предположению о совпадении истинных возрастных спектров, соответствующих разным навескам. В связи с этим системы линейных алгебраических уравнений, составленные для разных навесок, объединяются в одну общую систему уравнений. В полученной системе уравнений количество уравнений больше количества неизвестных i_l^0 , данная система решается методом наименьших квадратов [Вержбицкий, 2002]. По полученным значениям i_l^0 вычисляется функция $I(n)$ и далее возрастной спектр.

Увеличение количества навесок образца и изменение для каждой из них зависимости $f(n)$ обеспечивает увеличение количества базисных уравнений, входящих в общую систему уравнений. Таким об-

разом, за счет накопления экспериментальных данных задача реконструкции возрастного спектра переходит в область корректных задач (задач имеющих единственное, устойчивое решение). Чем больше базисных уравнений содержит общая система уравнений, тем точнее решение. Сведение интегрального уравнения (2) к системе уравнений (3) позволяет снизить необходимое количество навесок образца.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе показано, что на практике имеют место искажения возрастных спектров, обусловленные усреднением изотопного состава аргона при измерениях. Данные искажения могут быть весьма существенны и приводить к потере информативности возрастного спектра или искажению результатов датирования. Предложены методы аппроксимации возрастного спектра, обеспечивающие подавление данных искажений. Тестирование предложенных методов на экспериментальном примере показало их эффективность.

Предложен новый метод измерения возрастных спектров с высоким разрешением по доле выделенного газа. Предложенный метод измерений позволяет по мере необходимости, путем накопления экспериментальных данных, уточнять измеряемый возрастной спектр или его отдельные участки, что обеспечивает экономию материальных и временных ресурсов. Если возрастное плато определяется по трем ступеням, под действием случайных факторов возможна потеря (или возникновение ложного) возрастного плато. Как показывает практика, измерение изотопного состава аргона по нескольким напускам не гарантирует исключение данного фактора. Предложенный метод измерений обеспечивает подавление искажений, обусловленных действием случайных факторов. Кроме того, данный метод измерений реализуется на стандартных измерительных комплексах и имеет внутренний критерий проверки его применимости. Представленный метод может использоваться не только для измерения возрастных спектров при $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ датировании, но и для измерения других характеристик изотопных систем образцов при поэтапном выделении анализируемого вещества.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-35-00482 мол_а «Измерение возрастных спектров с высоким разрешением по доле выделенного аргона»; в рамках государственного задания (проект № 0330-2016-0013).

ЛИТЕРАТУРА

Алексеев Д.В. О реконструкции возрастных спектров // Сибирские электронные математические известия, 2015, т. 12, с. 5—14.

Алексеев Д.В., Травин А.В. Реконструкция характеристик изотопных систем образцов горных пород и минералов при датировании // Труды Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики — 2015» (19—23 октября, 2015, Академгородок), Новосибирск, 2015, с. 36—42.

Баскаков С.И. Радиотехнические цепи и сигналы. М., Высшая школа, 2000, 462 с.

Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М., Изд-во «БИНОМ. Лаборатория знаний», 2008, 636 с.

Васильева А.Б., Тихонов Н.А. Интегральные уравнения. М., Изд-во Моск. ун-та, 1989, 157 с.

Вержбицкий В.М. Основы численных методов. М., Высшая школа, 2002, 840 с.

Вулих Б.З. Введение в функциональный анализ. М., Государственное издательство физико-математической литературы, 1958, 352 с.

Гибшер А.А., Мальковец В.Г., Травин А.В., Белоусова Е.А., Шарыгин В.В., Конц З. Возраст камптонитовых даек агардагского щелочно-базальтоидного комплекса Западного Сангилен на основании Ar/Ar и U/Pb датирования // Геология и геофизика, 2012, т. 53 (8), с. 998—1013.

Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск, Сибирское научное издательство, 2009, 456 с.

Лебедев В.И. Функциональный анализ и вычислительная математика. М., ВИНТИ РАН, 1994, 212 с.

Bogard D.D., Garrison D.H. $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ age and thermal history of martian dunite NWA 2737 // Earth Planet. Sci. Lett., 2008, v. 273, p. 386—392.

Delpomdor F., Linnemann U., Boven A., Gartner A., Travin A., Blanpied C., Virgone A., Jelsma H., Preat A. Depositional age, provenance, and tectonic and paleoclimatic settings of the late Mesoproterozoic–middle Neoproterozoic Mbuji-Mayi Supergroup, Democratic Republic of Congo // Palaeogeogr. Palaeoclimatol. Palaeoecol., 2013, v. 389, p. 4—34.

Dickin A.P. Radiogenic isotope geology. New York, Cambridge University Press, 2005, 506 p.

Gutierrez-Alonso G., Collins A.S., Fernández-Suárez J., Pastor-Galán D., González-Clavijo E., Jourdan F., Weil A.B., Johnston S.T. Dating of lithospheric buckling: $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ ages of syn-orocline strike-slip shear zones in northwestern Iberia // *Tectonophysics*, 2015, v. 6453, p. 44—54.

Hyodo H. Laser probe $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ dating: History and development from a technical perspective // *Gondwana Res.*, 2008, v. 14, p. 609—616.

Ivanov A.V., Demonterova E.I., He H., Perepelov A.B., Travin A.V., Lebedev V.A. Volcanism in the Baikal rift: 40 years of active-versus-passive model discussion // *Earth Sci. Rev.*, 2015, v. 148, p. 18—43.

Lee G.K.W. Using argon as a temporal tracer of large-scale geologic processes // *Chem. Geol.*, 2009, v. 266, p. 104—112.

Lectures in isotope geology / Eds. E. Jager, J.C. Hunziker. Berlin, Heidelberg, New York, Springer-Verlag, 1979, 331 p.

McDonald C.S., Warren C.J., Mark D.F., Halton A.M., Kelley S.P., Sherlock S.C. Argon redistribution during a metamorphic cycle: Consequences for determining cooling rates // *Chem. Geol.*, 2016, v. 443, p. 182—197.

Negro F., Sigoyer J., Goffe B., Saddiqi O., Villa I.M. Tectonic evolution of the Betic–Rif arc: New constraints from $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ dating on white micas in the Tamsamani units (External Rif, northern Morocco) // *Lithos*, 2008, v. 106, p. 93—109.

Renne P.R., Mulcahy S.R., Cassata W.S., Morgan L.E., Kelley S.P., Hlusko L.G., Njau J.K. Retention of inherited Ar by alkali feldspar xenocrysts in a magma: Kinetic constraints from Ba zoning profiles // *Geochim. Cosmochim. Acta*, 2012, v. 93, p. 129—142.

Shi G., Lei W., He H., Ng Y.N., Liu Yan, Liu Yingxin, Yuan Y, Kang Z., Xie G. Superimposed tectono-metamorphic episodes of Jurassic and Eocene age in the jadeite uplift, Myanmar, as revealed by $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ dating // *Gondwana Res.*, 2014, v. 26, p. 464—474.

Vincenzo G.D., Rocchi S., Rossetti F., Storti F. $^{40}\text{Ar}/^{39}\text{Ar}$ dating of pseudotachylytes: the effect of clast-hosted extraneous argon in Cenozoic fault-generated friction melts from the West Antarctic Rift System // *Earth Planet. Sci. Lett.*, 2004, v. 223, p. 349—364.

*Рекомендована к печати 1 сентября 2016 г.
О.П. Полянским*

*Поступила в редакцию
18 апреля 2016 г.*