

镜质组反射率体的几何学

杨文宽 任传慧

(地质矿产部石油地质综合大队)

本文比较详细地论述了镜质组反射率体的几何性质和数学方程, 以及利用若干实测数据计算出向量 R_{max} 、 R_{int} 、 R_{min} 的大小和方位的方法。本文成果可应用于煤岩学、石油地球化学和构造地质学的有关研究工作。

镜质组反射率是一类向量, 其大小取决于其方位。如果我们把体积足够小的(因而其微观结构可被认为是十分规则的)某一颗镜质组颗粒所有无限多个方位的反射率都用从坐标系原点出发的箭头来表示, 那么, 这无限多个箭头的终点将连成一个封闭曲面。这个理论上的(假想的)封闭曲面, 形状特别, 没有现成的名称, 本文称之为镜质组反射率曲面。被这个曲面所包围的空间, 可以被想象成一个具有确定体积和外形的物体, 本文称之为镜质组反射率体(VRS)。反射率体任意一个方位的半径, 就是该方位的反射率。镜质组颗粒的任何一个实际磨光面, 都应被理解为通过反射率体中心(坐标系原点)的一个截面。

镜质组反射率是镜质组微观结构某些尚未查明的物理特性的表现, 长期以来被用作衡量煤的变质程度的指标和岩石中分散有机质热演化程度的指标, 还被进一步用作为

研究地温史和构造应力的根据。但是, 人们对镜质组反射率体的几何性质, 还讨论得很不够, 甚至还存在一些误解。例如, 某些论文作者把镜质组反射率体说成是几何学中的椭球体, 这就是很不严谨的。众所周知, 几何学讨论的椭球体, 其表面是处处向外凸出的, 服从“椭球方程”

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1$$

(式中 a 、 b 、 c 为椭球半轴长)。然而, 镜质组反射率体既可以是处处外凸的, 也可以是局部内凹的(图1), 它服从根本不同于椭球方程的方程(见下文)。

本文将比较详细地讨论镜质组反

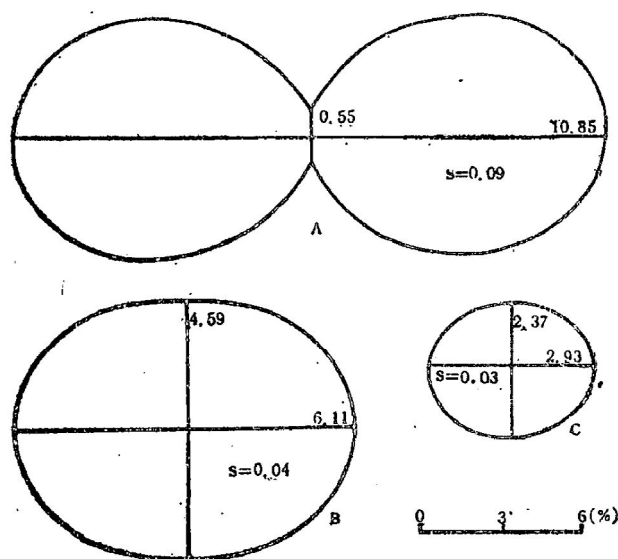


图1 反射率曲线实例

A—石墨任意方位磨光面, B—用舒兰褐煤加热而得到的无烟煤的任意方位磨光面, C—阳泉石炭系无烟煤垂直层面的磨光面。 s 表示反射率实测数据标准差

射率体的几何性质问题。就演化顺序而言, 是球状反射率体演化成为以向量 R_{min} 为旋转轴的旋转反射率体(过其中心只能作出一个圆截面), 再演化成为具有 R_{max} (最大反射率)、 R_{int} (中间反射率)和 R_{min} (最小反射率)三根主轴的三轴反射率体(过其中心可作出两个圆截面)。但从数学的角度看, 旋转反射率体不过是三轴反射率体的特例, 球状反射率体不过是旋转反射率体的特例。因此, 下文将首先讨论三轴反射率体。

本文所说的镜质组反射率, 包括石墨反射率, 煤的无结构镜质体(collinite)反射率, 以及褐煤的均匀凝胶体(levigellinite)或“充分分解腐木质体”(eu-ulminite)反射率。文中反射率均指浸油中的反射率。所有公式中的量都不是向量(式中 R 仅表示反射率的大小)。为印刷方便起见, 正文其他部分使用的向量符号均印白体而不印黑体。

一、三轴反射率体的几何性质

(一) 三轴反射率体方程

三轴反射率体具有互相垂直的3根主轴: R_{max} 轴, R_{int} 轴和 R_{min} 轴。这种反射率体只有一部分石墨和一部分无烟煤才有。根据我们的实测数据, 并参考国家标准GB6948—86附录B的有关叙述^[1], 可知三轴反射率体或三轴反射率曲面可以用这样一个经验方程来描述:

$$R = R_{max} \cos^2 \alpha + R_{int} \cos^2 \beta + R_{min} \cos^2 \gamma \quad (1)$$

式中 α 是向量 R 同向量 R_{max} 的夹角, β 是向量 R 同向量 R_{int} 的夹角, γ 是向量 R 同向量 R_{min} 的夹角。三者之间的关系是:

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1 \quad (2)$$

式(2)表明, 3个角度值中只有两个是独立的。给定任意两个角度值, 其他一个也就给定了。

全部或者部分地改变式(1)中 α 、 β 、 γ 这3个角度值的正负号, 或者以 180° 加、减这些角度值, 所算得的 R 值是相同的。这意味着, 三轴反射率曲面是具有互相垂直的3个对称面的有心封闭曲面。

如果以三轴反射率体的中心作为坐标系原点, 建立三维直角坐标系, 并且令 R_{max} 、 R_{int} 、 R_{min} 这三个向量逆时针方向依次定位(图2), 那么不难证明, 式(1)可以写成式(3)形式:

$$\begin{aligned} R = & (R_{max} \cos^2 \theta_{ax} + R_{int} \cos^2 \theta_{bx} + R_{min} \cos^2 \theta_{cx}) \cos^2 \theta_{rx} \\ & + (R_{max} \cos^2 \theta_{ay} + R_{int} \cos^2 \theta_{by} + R_{min} \cos^2 \theta_{cy}) \cos^2 \theta_{ry} \\ & + (R_{max} \cos^2 \theta_{az} + R_{int} \cos^2 \theta_{bz} + R_{min} \cos^2 \theta_{cz}) \cos^2 \theta_{rz} \end{aligned}$$

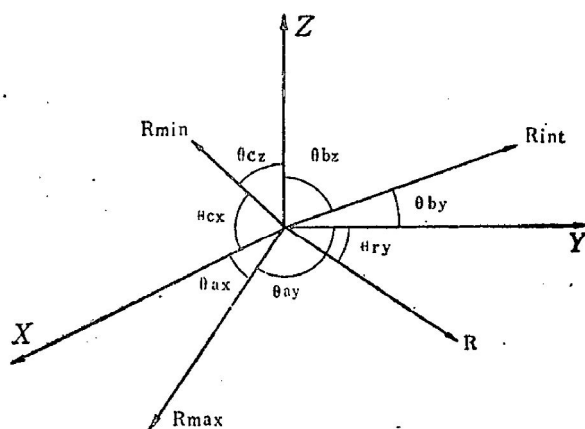


图2 主反射率向量与坐标轴的关系
X、Y、Z轴为坐标轴, R_{max} 、 R_{int} 、 R_{min} 为主反射率向量, R 为所考虑的任何反射率向量

$$\begin{aligned}
& + 2(R_{\max}\cos\theta_{ax}\cos\theta_{ay} + R_{\text{int}}\cos\theta_{bx}\cos\theta_{by} + R_{\min}\cos\theta_{cx}\cos\theta_{cy})\cos\theta_{rx}\cos\theta_{ry} \\
& + 2(R_{\max}\cos\theta_{ax}\cos\theta_{az} + R_{\text{int}}\cos\theta_{bx}\cos\theta_{bz} + R_{\min}\cos\theta_{cx}\cos\theta_{cz})\cos\theta_{rx}\cos\theta_{rz} \\
& + 2(R_{\max}\cos\theta_{ay}\cos\theta_{az} + R_{\text{int}}\cos\theta_{by}\cos\theta_{bz} + R_{\min}\cos\theta_{cy}\cos\theta_{cz})\cos\theta_{ry}\cos\theta_{rz}
\end{aligned} \quad (3)$$

式(3)中 θ_{rx} 、 θ_{ry} 和 θ_{rz} 分别表示向量 R 同 X 、 Y 、 Z 轴正方向的夹角, θ_{ax} 、 θ_{ay} 和 θ_{az} 分别表示向量 $R_{\max}$ 同 X 、 Y 、 Z 轴正方向的夹角, θ_{bx} 、 θ_{by} 和 θ_{bz} 分别表示向量 R_{int} 同 X 、 Y 、 Z 轴正方向的夹角, θ_{cx} 、 θ_{cy} 和 θ_{cz} 分别表示向量 $R_{\min}$ 同 X 、 Y 、 Z 轴正方向的夹角。

(二) 与坐标轴共线的反射率向量

1. 如果我们所关注的反射率向量是与 X 轴共线(即位于 X 轴之上)的反射率向量, 即 R_x , 那么, $\cos\theta_{rx} = \pm 1$, $\cos^2\theta_{rx} = 1$, 而 $\cos\theta_{ry} = 0$, $\cos\theta_{rz} = 0$ 。于是式(3)蜕化为:

$$R_x = R_{\max}\cos^2\theta_{ax} + R_{\text{int}}\cos^2\theta_{bx} + R_{\min}\cos^2\theta_{cx} \quad (4)$$

2. 如果式(3)中的 R 是与 Y 轴共线的反射率向量的长度, 即 R_y , 那么, $\cos^2\theta_{ry} = 1$, 而 $\cos\theta_{rx} = 0$, $\cos\theta_{rz} = 0$, 于是得到:

$$R_y = R_{\max}\cos^2\theta_{ay} + R_{\text{int}}\cos^2\theta_{by} + R_{\min}\cos^2\theta_{cy} \quad (5)$$

3. 同样可得到与 Z 轴共线的反射率向量的长度为:

$$R_z = R_{\max}\cos^2\theta_{az} + R_{\text{int}}\cos^2\theta_{bz} + R_{\min}\cos^2\theta_{cz} \quad (6)$$

(三) 任意截面上的反射率

式(3)表述的是一个具有互相垂直的3个对称面的有心封闭曲面。如果用任意一个通过此曲面中心的平面同这个曲面相截, 我们就会得到一根交线, 即得到一根表述此任意平面上任意一个反射率向量同它的方位角之间的关系的封闭曲线。此类曲线, 可称为反射率曲线。

实际工作中, 为了计算方便, 我们常对一块煤样(或石墨样)制作互相垂直的3个磨光面, 并且这样来建立三维直角坐标系: 令 X 、 Y 、 Z 轴的正方向恰好分别与这3个磨光面的外法线 N_x 、 N_y 、 N_z 的指向相一致(图3)。这3个磨光面事实上不可能通过同一颗镜

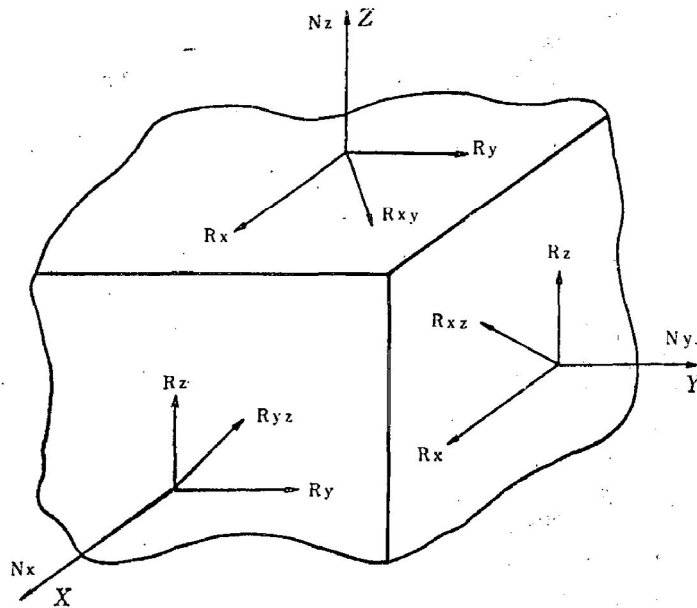


图3 互相垂直的三个磨光面的定位

质组颗粒的中心, 但是我们可以把它们都看成是通过式(3)曲面中心并与式(3)曲面相交截的任意平面。

1. XY平面上的反射率

在XY平面即 $z=0$ 的平面上, $\theta_{rz}=90^\circ$, $\cos\theta_{rz}=0$ 。以 $\cos\theta_{rz}=0$ 和式(4)、(5)、(6)代入式(3)中, 我们得到 $z=0$ 平面上的反射率曲线方程为:

$$R_{z=0} = R_x \cos^2 \theta_{rx} + R_y \cos^2 \theta_{ry} + (R_{\max} \cos \theta_{ax} \cos \theta_{ay} + R_{\min} \cos \theta_{bx} \cos \theta_{by} + R_{\min} \cos \theta_{cx} \cos \theta_{cy}) \cdot 2 \cos \theta_{rx} \cos \theta_{ry} \quad (7)$$

在这个 $z=0$ 的平面上, 我们可以测得一个同X、Y轴正方向都成 45° 角(即是说, $\theta_{rx}=45^\circ$, $\theta_{ry}=45^\circ$)的反射率向量。其长度为:

$$R_{xy} = \frac{1}{2}(R_x + R_y) + (R_{\max} \cos \theta_{ax} \cos \theta_{ay} + R_{\min} \cos \theta_{bx} \cos \theta_{by} + R_{\min} \cos \theta_{cx} \cos \theta_{cy}) \quad (8)$$

考虑到式(8), 可将式(7)写成:

$$R_{z=0} = R_x \cos^2 \theta_{rx} + R_y \cos^2 \theta_{ry} + 2[R_{xy} - \frac{1}{2}(R_x + R_y)] \cos \theta_{rx} \cos \theta_{ry} \quad (9)$$

根据式(9), 可知在 $z=0$ 平面上, 当 θ_{rx} 等于

$$\theta_{rx(m)} = \frac{1}{2} \arccos \frac{2R_{xy} - R_x - R_y}{R_x - R_y} \quad (10)$$

时, R 为极值。由式(10)决定的角度有两个, 二者相差 90° , 其中之一在第一象限内。对应于这两个角度的 R 值, 就是 $z=0$ 平面上的表观最大反射率 $R'_{\max(z)}$ 和表观最小反射率 $R'_{\min(z)}$ 。以式(10)代入式(9)中, 可以得到:

$$R'_{\max(z)} = \frac{1}{2}(R_x + R_y) + \frac{1}{2}[(2R_{xy} - R_x - R_y)^2 + (R_x - R_y)^2]^{1/2} \quad (11)$$

$$R'_{\min(z)} = \frac{1}{2}(R_x + R_y) - \frac{1}{2}[(2R_{xy} - R_x - R_y)^2 + (R_x - R_y)^2]^{1/2} \quad (12)$$

有了式(11)和(12), 我们就可以根据 R_{xy} 、 R_x 和 R_y 这3个实测值, 算出 $R'_{\max(z)}$ 和 $R'_{\min(z)}$ 。这是确定任意方位磨光面上表观最大反射率和表观最小反射率的一种好方法。在不转动动物台而必须转动起偏器的条件下, 此法可取, 但实测值要经过校正。此外, 将式(11)和(12)相加, 可知:

$$R_x + R_y = R'_{\max(z)} + R'_{\min(z)} \quad (13)$$

如果我们把X轴和Y轴在 $z=0$ 平面上转动 $\theta_{rx(m)}$ 角, 从而使得向量 $R'_{\max(z)}$ 与新坐标系 X' 轴共线, 向量 $R'_{\min(z)}$ 与新坐标系 Y' 轴共线, 那么, 在这个新坐标系中, R'_x 就是 $R'_{\max(z)}$, R'_y 就是 $R'_{\min(z)}$, 而 $2R'_{xy} - R'_x - R'_y = 0$, 于是式(9)成为:

$$R_{z=0} = R'_{\max(z)} \cos^2 \theta'_{rx} + R'_{\min(z)} \sin^2 \theta'_{rx} \quad (14)$$

式(14)中的 θ'_{rx} 表示坐标系转动后反射率向量同 X' 轴之间的夹角。式(14)描述的显然是一根有两个对称面($x'=0$ 平面和 $y'=0$ 平面)的有心封闭曲线。

2. XZ平面上的反射率

$$R_{y=0} = R_x \cos^2 \theta_{rx} + R_z \cos^2 \theta_{rz} + (2R_{xz} - R_x - R_z) \cos \theta_{rx} \cos \theta_{rz} \quad (15)$$

$$R'_{\max(y)} = \frac{1}{2}(R_x + R_z) + \frac{1}{2}[(2R_{xz} - R_x - R_z)^2 + (R_x - R_z)^2]^{1/2} \quad (16)$$

$$R'_{\min(y)} = \frac{1}{2}(R_x + R_z) - \frac{1}{2}[(2R_{xz} - R_x - R_z)^2 + (R_x - R_z)^2]^{1/2} \quad (17)$$

3. YZ平面上的反射率

$$R_{x=0} = R_y \cos^2 \theta_{ry} + R_z \cos^2 \theta_{rz} + (2R_{yz} - R_y - R_z) \cos \theta_{ry} \cos \theta_{rz} \quad (18)$$

$$R'_{\max(x)} = \frac{1}{2}(R_y + R_z) + \frac{1}{2}[(2R_{yz} - R_y - R_z)^2 + (R_y - R_z)^2]^{1/2} \quad (19)$$

$$R'_{\min(x)} = \frac{1}{2}(R_y + R_z) - \frac{1}{2}[(2R_{yz} - R_y - R_z)^2 + (R_y - R_z)^2]^{1/2} \quad (20)$$

二、三轴反射率体参数的确定

式(11)、(12)、(16)、(17)、(19)和(20)表明：在不包含 $R_{\max}$ 轴的任何磨光面上，我们不能直接测得 $R_{\max}$ 值而只能直接测得 $R'_{\max}$ 值；在不包含 $R_{\min}$ 轴的任何磨光面上，我们不能直接测得 $R_{\min}$ 值而只能直接测得 $R'_{\min}$ 值。我们必须对某一块样品制作足够多的磨光面，实测若干数据，才能把向量 $R_{\max}$ 、 R_{int} 和 $R_{\min}$ 的大小和方位算出来。如果我们想利用3个主反射率来研究地应力，这些工作是必须做的。

为了计算方便，我们应该对同一块样品制作互相垂直的3个磨光面，并以磨光面的外法线指向作为坐标轴正方向建立坐标系(图3)，然后在每个磨光面上对若干个测点进行测量，每个测点测3个读数(在 $z=0$ 平面上测 R_x 、 R_y 和 R_{xy} ，在 $y=0$ 平面上测 R_x 、 R_z 和 R_{xz} ，在 $x=0$ 平面上测 R_y 、 R_z 和 R_{yz} ，图3)。获得这些读数后，就可以计算出每个磨光面上3类读数各自的平均值。 R_x 、 R_y 和 R_z 都可在两个磨光面上测得，但所测颗粒实际上并非同一个颗粒，3个磨光面的光洁度也不一定相同，故两个磨光面上的平均值不一定相同。此时要综合考虑各方面因素，确定 R_x 、 R_y 和 R_z 的代表性数值(校正值)。

接着而来的问题是如何根据最后确定的6个数据，即 R_x 、 R_y 、 R_z 、 R_{xy} 、 R_{xz} 和 R_{yz} ，来算出向量 $R_{\max}$ 、 R_{int} 和 $R_{\min}$ 的长度和方位角。为此，我们引入 a_{11} 、 a_{12} 、 a_{13} 等9个新符号：

$$\begin{aligned} a_{11} &= R_x \\ a_{22} &= R_y \\ a_{33} &= R_z \\ a_{12} &= a_{21} = R_{xy} - \frac{1}{2}(R_x + R_y) \\ a_{13} &= a_{31} = R_{xz} - \frac{1}{2}(R_x + R_z) \\ a_{23} &= a_{32} = R_{yz} - \frac{1}{2}(R_y + R_z) \end{aligned} \quad (21)$$

于是，式(3)可以写成：

$$R = a_{11} \cos^2 \theta_{rx} + a_{12} \cos \theta_{rx} \cos \theta_{ry} + a_{13} \cos \theta_{rx} \cos \theta_{rz}$$

$$\begin{aligned}
 &+a_{21}\cos\theta_{rx}\cos\theta_{ry}+a_{22}\cos^2\theta_{ry}+a_{23}\cos\theta_{ry}\cos\theta_{rz} \\
 &+a_{31}\cos\theta_{rx}\cos\theta_{rz}+a_{32}\cos\theta_{ry}\cos\theta_{rz}+a_{33}\cos^2\theta_{rz}
 \end{aligned} \quad (22)$$

式(22)中的9个 a_{ij} 值($i=1, 2, 3; j=1, 2, 3$)是随坐标系转动而变化的,而且服从二阶张量的变化规律。于是我们面临的问题,可归结为求出二阶对称张量 a_{ij} 的固有方位和固有值的问题。这个问题,数学家早已解决了,这里仅结合反射率体这个具体研究对象的实际情况,介绍解题步骤而不交代推导过程。

(一) 主反射率的计算

首先,我们作出行列式方程:

$$\begin{vmatrix} a_{11}-R & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22}-R & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33}-R \end{vmatrix} = 0 \quad (23)$$

式(23)展开后,是一个一元三次方程:

$$R^3 - H_1 R^2 + H_2 R - H_3 = 0 \quad (24)$$

式(24)中的 H_1 、 H_2 和 H_3 是二阶对称张量 a_{ij} 的不变量(即不随坐标系转动而变化的量),其意义如下:

$$H_1 = a_{11} + a_{22} + a_{33} = R_x + R_y + R_z = R_{max} + R_{int} + R_{min} \quad (25)$$

$$\begin{aligned}
 H_2 &= a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{11}a_{33} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2 \\
 &= R_{max}R_{int} + R_{int}R_{min} + R_{max}R_{min}
 \end{aligned} \quad (26)$$

$$H_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = R_{max}R_{int}R_{min} \quad (27)$$

从式(25)、(26)和(27)可以看出, H_1 、 H_2 和 H_3 都必然是正数。如果算出的 H_1 、 H_2 和 H_3 不全都是正数,则计算过程有误。此外,如果我们所研究的确实是三轴反射率体,则下列方程必然成立:

$$3H_2 - H_1^2 < 0 \quad (28)$$

$$4(H_1^2 - 3H_2)^3 > (27H_3 + 2H_1^3 - 9H_1H_2)^2 \quad (29)$$

从式(24)可解出 R_1 、 R_2 、 R_3 共3个根,其中最大的一个是 R_{max} ,最小的一个是 R_{min} ,其余一个是 R_{int} 。事实上,只要把算出的 H_1 、 H_2 和 H_3 代入下列3个方程中,就可以把这3个根求出来:

$$R_1 = \frac{H_1}{3} + \frac{2}{3}[H_1^2 - 3H_2]^{1/2} \cos\left[\frac{1}{3}\arccos\frac{27H_3 + 2H_1^3 - 9H_1H_2}{2(H_1^2 - 3H_2)^{3/2}}\right] \quad (30)$$

$$R_2 = \frac{H_1}{3} + \frac{2}{3}[H_1^2 - 3H_2]^{1/2} \cos\left[120^\circ + \frac{1}{3}\arccos\frac{27H_3 + 2H_1^3 - 9H_1H_2}{2(H_1^2 - 3H_2)^{3/2}}\right] \quad (31)$$

$$R_3 = \frac{H_1}{3} + \frac{2}{3}[H_1^2 - 3H_2]^{1/2} \cos\left[240^\circ + \frac{1}{3}\arccos\frac{27H_3 + 2H_1^3 - 9H_1H_2}{2(H_1^2 - 3H_2)^{3/2}}\right] \quad (32)$$

算出的 R_1 、 R_2 和 R_3 是否正确,可用式(25)、(26)、(27)来检验。

(二)主反射率向量方位角的计算

向量 R_{max} 的方位角 θ_{ax} 、 θ_{ay} 、 θ_{az} 可利用下列方程组求出(头3个方程只用任意两个即可):

$$(a_{11}-R_{max})\cos\theta_{ax}+a_{12}\cos\theta_{ay}+a_{13}\cos\theta_{az}=0 \quad (33)$$

$$a_{21}\cos\theta_{ax}+(a_{22}-R_{max})\cos\theta_{ay}+a_{23}\cos\theta_{az}=0 \quad (34)$$

$$a_{31}\cos\theta_{ax}+a_{32}\cos\theta_{ay}+(a_{33}-R_{max})\cos\theta_{az}=0 \quad (35)$$

$$\cos^2\theta_{ax}+\cos^2\theta_{ay}+\cos^2\theta_{az}=1 \quad (36)$$

向量 R_{min} 的方位角可用同样的方法求出,只需把式(33)至(36)中的 R_{max} 、 θ_{ax} 、 θ_{ay} 、 θ_{az} 分别换为 R_{min} 、 θ_{cx} 、 θ_{cy} 和 θ_{cz} 。在求向量 R_{int} 的方位角时,则需分别换为 R_{int} 、 θ_{bx} 、 θ_{by} 和 θ_{bz} 。

在 θ_{ax} 等9个角度值中,只有任意3个是独立的,其余6个完全由这3个角度值决定。利用式(33)至(36)及其类似方程组直接求出的是余弦值而不是角度值。一个不等于1或-1的余弦值总是对应着正负两个角度值,因为我们所讨论的 θ_{ax} 等都是夹角,故只应取正的角度值。如果有必要保证 R_{max} 、 R_{int} 、 R_{min} 这3个主反射率向量严格地按大小逆时针方向排列(图2),那么在全部9个余弦值计算出来之后,需要进行一次检查。检查方法之一,是看下式是否成立:

$$\begin{vmatrix} \cos\theta_{ax} & \cos\theta_{ay} & \cos\theta_{az} \\ \cos\theta_{bx} & \cos\theta_{by} & \cos\theta_{bz} \\ \cos\theta_{cx} & \cos\theta_{cy} & \cos\theta_{cz} \end{vmatrix} = 1 \quad (37)$$

如果行列式的值是-1而不是1,那就说明所考虑的3个主反射率向量是顺时针排列的。

现在列举一个算例。石墨反射率以1%为单位, $R_x=12.38$, $R_y=5.96$, $R_z=7.24$, $R_{xy}=7.16$, $R_{xz}=10.29$, $R_{yz}=0.55$ 。那么, $a_{11}=12.38$, $a_{22}=5.96$, $a_{33}=7.24$, $a_{12}=a_{21}=-2.01$, $a_{13}=a_{31}=0.48$, $a_{23}=a_{32}=-6.05$; $R_1=14.29(=R_{max})$, $R_2=0.40(=R_{min})$, $R_3=10.89(=R_{int})$; $\theta_{ax}=46.8^\circ$, $\theta_{ay}=122.0^\circ$, $\theta_{az}=59.9^\circ$, $\theta_{bx}=43.5^\circ$, $\theta_{by}=66.6^\circ$, $\theta_{bz}=124.3^\circ$, $\theta_{cx}=84.3^\circ$, $\theta_{cy}=41.5^\circ$, $\theta_{cz}=49.1^\circ$ 。

三、旋转反射率体

一般烟煤和无烟煤的反射率体是具有一根旋转轴的几何体,旋转轴与向量 R_{min} 共线,赤道半径等于 R_{max} 。这种旋转反射率体在数学上可看作是 R_{int} 等于 R_{max} 的三轴反射率体,即可以看作是三轴反射率体的一种特例。因此,以 R_{max} 代替式(3)中的 R_{int} ,就得到了三维直角坐标系中旋转反射率体的表述式。

如果我们对一块煤样制作一个磨光面,并令此磨光面的外法线指向与坐标系的Z轴正方向一致,那么,类似上文式(9)的一个方程即可用来描述此磨光面上反射率向量 R 与其方位角之间的关系:

$$R=R_x\cos^2\theta_{rx}+R_y\cos^2\theta_{ry}+(2R_{xy}-R_x-R_y)\cos\theta_{rx}\cos\theta_{ry} \quad (38)$$

当式(38)中的 θ_{rx} 值等于式(10)决定的两个 $\theta_{rx(m)}$ 值时, 我们测得的两个 R 值分别为 R_{max} 和 R'_{min} 。如果我们把坐标系旋转一下, 令向量 R_{max} 与 X' 轴共线, 向量 R'_{min} 与 Y' 轴共线, 那么, 式(38)将简化成为:

$$R = R_{max} \cos^2 \theta'_{rx} + R'_{min} \sin^2 \theta'_{rx} \quad (39)$$

式(39)中的 θ'_{rx} 是坐标系旋转后向量 R 与 X' 轴的夹角。从式(39)出发, 可以证明, 当 R_{max} 大于 $1.5R'_{min}$ 时, 曲线的短轴部位是内凹的, 和椭圆根本不同; 当 R_{max} 小于 $1.5R'_{min}$ 时, 曲线处处外凸, 有点象椭圆, 但实际上也不是椭圆。这个结论也适用于三轴反射率体, 因为式(14)和式(39)是相似的。

在任何一个任意方位的磨光面上, 我们都可直接测得真正最大反射率 R_{max} 。但要得知真正最小反射率 R_{min} 的数值, 就必须制作互相垂直的3个磨光面, 测得3个表现最小反射率值, 并进行必要的计算。

我们把式(11)、(12)、(16)、(17)、(19)、(20)相加, 并考虑到式(25), 得知:

$$\sum R'_{max} + \sum R'_{min} = 2(R_{max} + R_{int} + R_{min}) \quad (40)$$

对旋转反射率体来说, R'_{max} 等于 R_{max} , R'_{int} 也等于 R_{max} , 故式(40)可以写成:

$$R_{min} = \frac{1}{2} (R'_{min(x)} + R'_{min(y)} + R'_{min(z)} - R_{max}) \quad (41)$$

据式(41)可以算出旋转反射率体的 R_{min} 。但这种计算并不总是必要的, 因为 R_{min} 同 R_{max} 之间存在明显的相关关系(van Krevelen, 1981, Table XVII-1)^[2]。后者能提供前者可能提供的地质信息。

四、其他问题

如果我们对一个任意方位的磨光面上的一个测点测得了 n 个($n \geq 5$)反射率值, 相邻两个反射率向量之间的夹角都是 $360^\circ/n$, 那么, 我们可以用下列公式来求出 R'_{min} 、 R'_{max} (对三轴反射率体而言)或 R_{max} (对旋转反射率体而言):

$$R'_{max} \text{ (或 } R_{max}) = \frac{1}{n} \sum R_i + \frac{1}{n} [2n \sum R_i^2 - 2(\sum R_i)^2]^{1/2} \quad (42)$$

$$R'_{min} = \frac{2}{n} \sum R_i - R'_{max} \quad (43)$$

当 n 个反射率向量分布均匀时, n 必须大于或等于5。如果试图减少反射率向量的数目, 那么这些反射率向量的方位角就需作些限制。当 $n=3$ 时, 方位角应取为 α_1 、 $\alpha_1 + 60^\circ$ 、 $\alpha_1 + 120^\circ$ 。当 $n=4$ 时, 方位角应取为 α_1 、 $\alpha_1 + 45^\circ$ 、 $\alpha_1 + 90^\circ$ 、 $\alpha_1 + 135^\circ$ 。这里的 α_1 是指实测的第一个反射率向量同某一个参照性方向(例如 X 轴正方向, 物台 0° 方向, 起偏器 0° 方向, 等)的夹角。物台转动, 容易使实际测点发生更换。因此在仪器性能允许时, 最好转动起偏器而不转动物台。但用转动起偏器方法测得的反射率值, 需要进行校正。

五、结 论

1. 镜质组反射率是一类其大小取决于其方位的量, 即向量。
2. 体积足够小、以致可被认为具有十分规则的内部微观结构的一个镜质组颗粒, 理论上无限多个反射率向量 (对应于任意一个方位, 有一个确定的反射率值)。以这无限多个反射率向量为半径的假想几何体, 本文称之为镜质组反射率体(VRS)。
3. 镜质组反射率体服从特定的数学方程, 即式(1)。它不是几何学中的椭球体。
4. 根据在3个互相垂直的磨光面上测得的6个读数(校正值), 可以算出镜质组反射率体3个主轴 (3个主反射率向量) 的方位和大小。计算过程可归结为求解二阶对称张量的固有方位和固有值的问题。本文介绍的方法是一种比较简便的方法。
5. 本文成果可应用于煤岩学、石油地球化学、构造地质学的有关研究工作, 例如古地应力研究工作。

参 考 文 献

- [1] 国家标准局, 1986, 煤的镜质组反射率测定方法, GB6948—86, 中国标准出版社。
[2] van Krevelen, D.W., 1981, Coal, Elsevier Sci. Pub. Co., Amsterdam, Oxford, New York.

GEOMETRY OF VITRINITE REFLECTANCE SOLID

Yang Wenkuan Ren Chuanhui

(Comprehensive Research Institute of Petroleum Geology,
Ministry of Geology and Mineral Resources)

Abstract

Vitrinite reflectances may be described by vectors starting from the origin of three-dimensional coordinate-system. The length of a reflectance vector depends on its direction. Theoretically, any vitrinite particle has infinite reflectance vectors. These vectors construct a three-dimensional figure called "vitrinite reflectance solid" (VRS). The three principal axes of VRS are maximum reflectance R_{max} , intermediate reflectance R_{int} and minimum reflectance R_{min} respectively. The VRS may be double concave, and is not a standard ellipsoid of geometry.

This paper deals with the geometrical features of VRS in detail, and provides a method for determining the lengths and directions of the principal axes by six readings measured on three mutually perpendicular polished-surface. This method may be used for the studies of petroleum geochemistry, coal petrology and structural geology.