

方解石 e-双晶的古应力分析：原理和展望

郑 剑^{1, 2, 3}, 单业华^{1, 3*}

(1.中国科学院 广州地球化学研究所, 中国科学院 边缘海与大洋地质重点实验室, 广东 广州 510640; 2.中国科学院大学, 北京 100049; 3.中国科学院 地球科学研究院, 北京 100029)

摘 要: 方解石 e-双晶是在低温、低围压环境下发育的一种晶内塑性变形, 广泛发育于亮晶灰岩和大理岩中。由于 e-双晶的形成与地应力密切相关, 与其相关的古应力分析原理得到了深入的研究, 相继提出了两类分析方法, 即图解法和反演法。通过方解石 e-双晶的古应力分析, 我们可以获得形成时的主应力方位、应力比, 甚至绝对的差应力, 因而该分析方法被广泛运用于未遭受明显构造变形的地区, 如克拉通盆地、褶皱-冲断带等。本文首先简单地回顾了方解石 e-双晶古应力分析的研究历史, 总结了图解法和反演法的基本原理, 然后评价了影响这些方法的一些可能因素, 如方法的局限性和数据的质量, 最后指出今后在数据获取和多期数据反演两个方面值得进一步研究。

关键词: 方解石 e-双晶; 古应力分析; 图解法; 反演法; 多期数据

中图分类号: P545 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-1552(2020)01-0047-010

0 引 言

在适当的应力作用下, 方解石晶体会沿着特定的结晶学平面向光轴发生滑移, 形成机械双晶, 即所谓的 e-双晶(e-twin)。方解石双晶化作为晶内塑性变形的产物之一, 代表着一种低温、低围压的显微变形机制, 广泛发育于地表或近地表、含有方解石的各种岩石(包括结晶灰岩、大理岩和方解石脉等)中。考虑到 e-双晶的形成与应力和温度密切相关, 在过去的半个多世纪里围绕此方面已开展大量的理论和实验研究, 提出了基于 e-双晶的温度计(Ferrill, 1991; Ferrill et al., 2004)、应变计(Groshong, 1972; Groshong et al., 1984)和古应力计(Jamison and Spang, 1976; Rowe and Rutter, 1990)。这些工作丰富了构造动力学分析的内涵, 进而有助于深入认识区域构造的形成和演化。

方解石 e-双晶是上地壳岩石中被广泛认可的古应力指示物之一(Lacombe, 2010)。如何利用露头或显微尺度的变形构造定量或半定量地估计形成时的地应力? 这属于古应力分析的范畴。目前最常用的古应力分析方法是断层擦痕数据反演法(Angelier, 1984, 1990)。该方法的必要条件是在一定范围内的露头上测量得到相对大量的断层擦痕数据, 因此限制了它的广泛应用, 至少在出露条件差的地区。相比之下, 基于方解石机械双晶的古应力分析方法具有广泛的应用前景, 因为自然界中碳酸岩非常发育, 且出露条件普遍较好, 加上 e-双晶比断层对应力更为敏感, 能记录到更微弱的构造变形作用(Burkhard, 1993; Rocher et al., 2000)。它几乎适用于所有的构造环境, 例如几乎没有遭受构造变形的克拉通盆地(Rocher et al., 2004; Tripathy and Saha, 2015)和遭受构造变形的褶皱-冲断带(Rocher et al., 1996; González-Casado

收稿日期: 2018-06-10; 改回日期: 2019-06-12

项目资助: 中国科学院科技先导项目 B 类(XDB18030104)和国家自然科学基金项目(41476035、41772206)联合资助。

第一作者简介: 郑剑(1993-), 男, 硕士研究生, 构造地质学专业。Email: zhengjian_123@aliyun.com

通信作者: 单业华(1968-), 男, 研究员, 主要从事构造地质学基础理论及其应用的研究。Email: shanyh@gig.ac.cn

and García-Cuevas, 1999; Lacombe et al., 2007)、前陆盆地(Rocher et al., 2000)、陆缘伸展盆地(Burgin et al., 2018)等, 甚至是陨石冲击构造中(Schedl, 2006)。

功能上, 基于 e-双晶的古应力分析方法分为图解法(Turner, 1953; 宋鸿林, 1982; Pfiffner and Burkhard, 1987)和反演法(Spang, 1972; Laurent et al., 1981, 1990; Etchecopar, 1984; Yamaji, 2015)两大类。前者通过立体网上的数据操作来确定出最大和最小主应力的产状范围, 而后者求解描述 e-双晶的不等式得到主应力产状和应力差, 即绝对的偏应力张量。在现用于有古应力分析的各种变形构造中, e-双晶是能够直接反演得到绝对偏应力张量的唯一变形构造。

本文回顾了方解石 e-双晶古应力分析的研究历史, 总结了图解法和反演法的基本原理, 评价了影响这些方法准确度的可能因素, 并提出了展望。

1 回顾

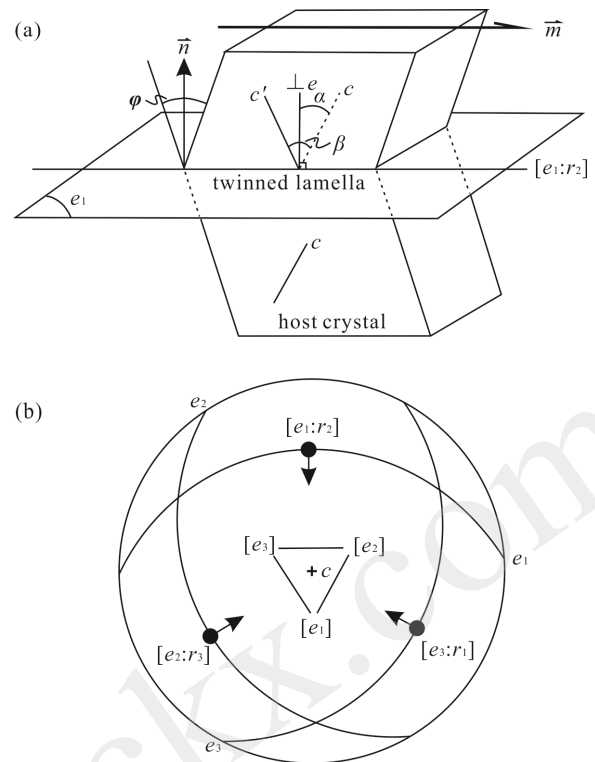
早在 1883 年 O. Mügge 就观察到方解石晶体中的双晶滑移现象。之后对方解石显微变形机制的细致研究发现, 方解石存在着两类滑移系: 沿 $e\{01\bar{1}2\}$ 的双晶滑移(twin gliding)和沿 $r\{10\bar{1}1\}$ 或 $f\{02\bar{2}1\}$ 的平移滑动(translation gliding)。两者的主要区别在于前者是沿滑移面发生固定的剪应变, 造成双晶化部分与未双晶化部分呈镜像对称关系(图 1a); 而后者则沿滑移面发生晶体格架层的整体平移(Carter and Raleigh, 1969)。值得注意的是: 双晶滑移只能沿滑移面上的滑移线向光轴方向滑动, 并满足 Schmid 定律, 即当沿滑移方向上的分解剪应力 τ_s 达到该滑移系启动的临界剪应力值 τ_c 时, 双晶才会启动。因此, 双晶化和未双晶化的 e-双晶面(以下简称 e-面)分别满足:

$$\tau_s = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \geq \tau_c \quad (1)$$

$$\tau_s = \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} < \tau_c \quad (2)$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为启动双晶的有效应力, \mathbf{m} 和 \mathbf{n} 分别代表滑移线方向和双晶面法线的单位矢量。 τ_c 一般为 10 MPa (Burkhard, 1993)。

20 世纪 50 年代, 美国科学家 Griggs 和 Turner 等通过方解石单晶和大理岩的变形实验发现, 方解石 e-双晶与施加的构造应力存在着一定的空间关系(Griggs et al., 1951; Turner, 1953; Turner et al., 1954)。Turner (1953)率先注意到这一特征的动力学意义, 结合 e-双晶的结晶学规律及滑移机制提出了确定主应



(a) c 和 c' 分别代表主晶光轴和双晶光轴, 二者的夹角 β 为 52° ; $\perp e$ 代表双晶面的法线, 与主晶光轴的夹角 α 为 26° ; φ 为剪切角, 为 37.5° ; $[e_1:r_2]$ 代表双晶面 e_1 上的滑移线; (b) 三个 e-双晶面的赤平投影, 以主晶光轴 c 为中心对称分布。

图 1 方解石 e-双晶的结晶学要素示意图(引自 Laurent et al., 1990)

Fig.1 Schematic illustration for crystallographic elements of calcite e-twins

力方位的 P-T 图解法, 并利用一些大理岩实验样品对该方法进行了验证。这一开创性的研究掀起了显微组构动力学分析的热潮, 不久相继出现了基于石英、云母、橄榄石等矿物的古应力分析方法(Carter and Raleigh, 1969)。

由于对方解石 e-双晶形成机制认识最为清楚, Turner (1953)提出的 P-T 法得到不断的完善和深化, 先后出现了与此有关的一系列方法, 如数值动力学分析方法(Spang, 1972)、光轴图解法(宋鸿林, 1982)和直二面角图解法(Pfiffner and Burkhard, 1987)。特别是 Spang (1972)提出的数值动力学分析方法, 它引入了应力张量的概念, 利用计算机处理双晶数据, 由此避免了耗时的赤平投影工作, 开启了 e-双晶动力学量化研究的大门。

另一方面, Laurent et al. (1981)提出一种利用线性规划方法求解描述 e-双晶的不等式得到偏应力张量的反演法。这标志着对方解石 e-双晶的古应力分

析真正进入数值化的研究阶段。此后, 各种反演法(如 Etchecopar, 1984; Laurent et al., 1990; Yamaji, 2015)被相继提出。反演法的有效性已经在实际研究中得到了验证(Lacombe et al., 1990; Tourneret and Laurent, 1990)。

2 图解法

图解法包括 P-T 图解法(Turner, 1953)、直二面角图解法(Pfiffner and Burkhard, 1987)和光轴图解法(宋鸿林, 1982)。其目的是将获得的双晶数据转化为立体网上可视化的投点, 能够直观地分析最大和最小主应力方位。

2.1 P-T 图解法

Handin and Griggs (1951)通过变形实验发现, 方解石双晶启动的最理想应力状态是: 压缩轴 P 和拉张轴 T 位于 e-双晶面法线和光轴组成的平面内, 与滑移面成 45° 夹角, 且符合 e-双晶的剪切方向(图 2a)。因此, Turner (1953)假定每个 e-双晶只形成在这种应力状态下, 提出了确定主应力方位的 P-T 图解法。其流程如下: ①根据图 2a 所示的几何关系, 确定每个 e-双晶的 P 和 T 方位; ②将不同双晶求出的每组 P 和 T 方位进行赤平投影(图 2b), 并作出 P 和 T 的等密度图; ③识别相当于主应力 σ_1 和 σ_3 方位的最大密度点或区(图 2c)。需要说明的是, 这样得到的 σ_1 和 σ_3 方位往往不是严格正交的, 因此需要进行某种校正。

在实际观察中, 经常能见到发育两组或三组双

晶的方解石晶粒, 但 Turner 的方法规定只选取双晶密度最大的一组。这种选择性的数据采集显然会使推导的主应力方位偏离真实情况。Nissen (1964)假定当同时发育两组或三组双晶时, 真实的应力状态应使各双晶化 e-面对应的分解剪应力系数同时达到最大, 进而推导出所代表的不同应力状态: ①在两组双晶的情形下, 压缩轴垂直光轴, 并与两组双晶化 e-面的极点共面, 而拉张轴平行未双晶化 e-面的法线(图 2d); ②在三组双晶的情形下, 拉张轴平行光轴, 处于单轴拉伸应力状态(图 2e); ③在无双晶的情形下, 压缩轴平行光轴, 处于单轴压缩应力状态(图 2f)。

2.2 直二面角图解法

Pfiffner and Burkhard (1987)将断层擦痕分析中的直二面角图解法(Right-dihedra method; Angelier and Mechler, 1977)运用于方解石双晶: e-双晶面相当于断层面, 而滑移线则相当于擦痕。该方法的原理是利用滑移面和与滑移线垂直的辅助面将三维方向空间分为四个象限(图 3a), 其中象限 P 和 T 分别代表着压缩轴(σ_1)和拉张轴(σ_3)的可行区域, 而滑移面和辅助面的交线相当于中间主应力轴 σ_2 的方向(图 3b)。如果所有的双晶形成在同一的应力场下, 那么象限 P 或 T 的最大重叠区代表着 σ_1 或 σ_3 方位的最佳可行区域(图 3c)。此外, 还可以根据最大重叠区与所有双晶数的比值评估这种假设的合理性。当该比值明显地偏离 1 时, 该数据体不适合做这样的古应力分析, 因为存在着至少两期构造作用。它的进一步

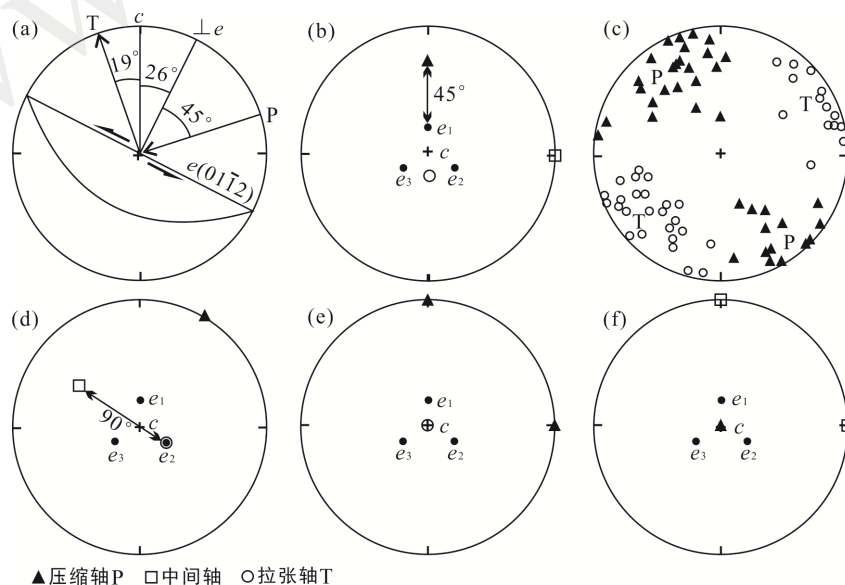


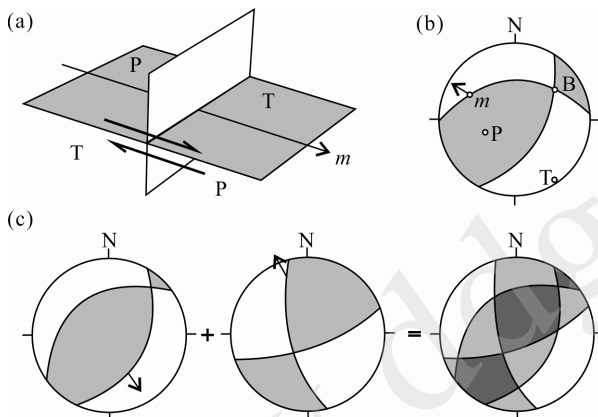
图 2 P-T 图解法的示意图(a 和 c 引自 Turner, 1953; b、d、e 和 f 引自 Laurent et al., 1990)

Fig.2 Schematic diagram of P-T graphic method

处理需要采用非常复杂且不可可视化的一些特殊方法(Nemcok et al., 1999), 但限于篇幅, 这里不做关于这些方法的任何介绍。

2.3 光轴图解法

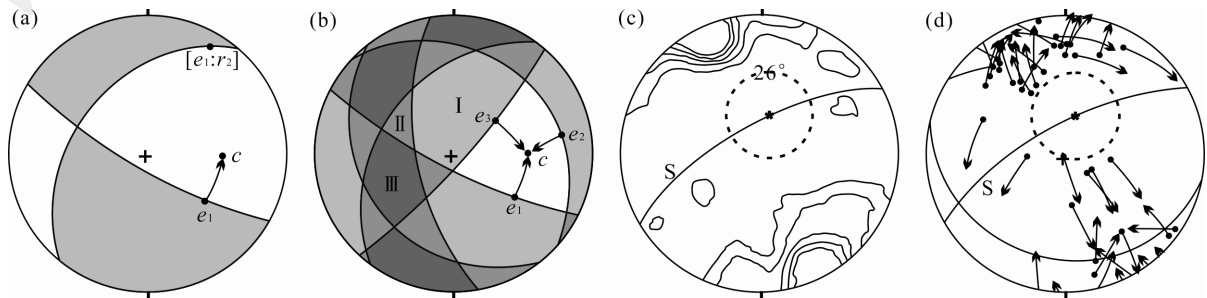
如前文所述, 方解石 e-双晶滑动只能沿滑移线朝向光轴方向。在立体投影图中, 这种关系可以用由双晶法线 e_1 指向光轴 c 的带箭头线段表示(图 4a; 宋鸿林, 1982), $e_1 \wedge c = 26^\circ$ 。由直二面角图解法的原理可知, 启动该双晶的主应力 σ_1 只能位于压缩象限内, 即图 4a 中的浅灰色区域。对于发育一组双晶的情形, σ_1 还应满足: $\sigma_1 \wedge c > 26^\circ$ 。于是, 当这样的数据足够多时, 方解石光轴极图上会呈现出一个半径约为 26° 的空白圆区, 其圆心就是 σ_1 的方向(图 4c), 而极点 e_1 到光轴 c 的箭头都会背向小圆(图 4d)。同理, 发育两组和三组双晶时的 σ_1 应分别满足: $\sigma_1 \wedge c > 44.5^\circ$ 、 $\sigma_1 \wedge c > 64^\circ$ (图 4b)。



单个断层面及其辅助面(a)的立体投影(b)。m 表示滑移线, B 点为断层面与辅助面之间的交线。如此, 两个断层数据的投影叠加(c)可以大幅度地减少主应力轴的可行区域。

图 3 直二面角图解法的示意图(引自 Angelier and Mechler, 1977)

Fig.3 Schematic diagram of right-dihedra graphic method



(a) 由某一给定的双晶面及其辅助面限定的拉张区和压缩区; (b) 方解石 e-双晶组系与最大应力轴可行区域之间的关系, I、II 和 III 分别表示在只发育一、二和三组双晶的情形下最大主应力轴的可行区域; (c) 某一给定例子的双晶化方解石光轴等密图; (d) 该例子中从每个颗粒双晶面法线(圆点)到光轴(箭头)的连线。

图 4 光轴图解法原理的示意图(引自宋鸿林, 1982)

Fig.4 Schematic diagram of optical axis graphic method

这种方法能更加直观地显示出 σ_1 的方位, 但无法得到其他主应力方位。它曾成功地应用于瑞士西部赫尔文特推覆体的构造研究中(Dietrich and Song, 1984)。

3 反演法

反演法又称数值动力学分析方法, 是依靠计算机的强大数值计算能力, 直接或间接地求解描述双晶化和(或)未双晶化的不等式得到最佳的偏应力张量, 因此分为间接反演法和直接反演法两类。

3.1 间接反演法

受方解石双晶应变分析的启发, Spang (1972)假设小变形样品整体的应变张量可以近似地等价于应力张量, 且每组双晶所引起的剪应变变量相同, 由此提出了一种基于 P-T 图解法(Turner, 1953)的数值动力学分析方法。由于双晶只发生在双晶面上的特定方向上, 而在垂直滑移线的方向上基本不产生任何应变, 每组双晶代表的应变可以表示成以下形式的二阶张量:

$$E_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} +1.0 & 0 & 0 \\ 0 & -1.0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

其中+1.0 和-1.0 分别代表压缩轴 P 和拉张轴 T 的大小。为了得到实际状态下的应变张量, 需要将上述薄片坐标系下的张量 $E_{\alpha\beta}$ 旋转到统一的地理坐标系(如: 坐标系的 x、y、z 轴分别指向北、东、下)下。这样转换后的应变张量见下式:

$$E_{ij} = \begin{pmatrix} p^2 - p'^2 & pq - p'q' & pr - p'r' \\ pq - p'q' & q^2 - q'^2 & qr - q'r' \\ pr - p'r' & qr - q'r' & r^2 - r'^2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

其中 p 、 q 、 r 和 p' 、 q' 、 r' 分别是压缩轴和拉张轴在现实坐标系下的方向余弦。然后, 对所有双晶的张量 E_{ij} 求和并取平均值, 即得到了整体应变张量, 而该张量的特征向量和特征值代表着主应力的方向和相对大小。该方虽然来源于 Turner (1953) P-T 图解法, 但具有后者所没有的一些优点: 避免耗时的赤平投影, 确保主应力的正交性。

3.2 直接反演法

与上述的古应力分析方法不同, 直接反演法通过直接求解描述双晶化和(或)未双晶化的不等式获得最佳的偏应力张量 σ_D :

$$\sigma_D = \begin{pmatrix} X_1 & X_2 & X_3 \\ X_2 & X_4 & X_5 \\ X_3 & X_5 & X_6 \end{pmatrix} \quad (5)$$

其中 $X_1+X_4+X_6=0$, 由于变形构造几乎只形成在偏应力状态下, 我们不可能通过古应力分析直接得到完整的应力张量。理论上讲, 该方法能够计算出完整的偏应力张量, 这是其他变形构造的古应力分析方法所不及的。直接反演法代表着目前方解石双晶古应力分析的发展方向。自最早 Laurent et al. (1981) 提出线性规划法以来, 又相继出现了许多其他的反演法(Etchecopar, 1984; Laurent et al., 1990; Yamaji, 2015)。

3.2.1 Laurent 反演法

Laurent et al. (1981) 首先直接利用线性规划法求解出在不等式(1)和(2)约束下六维应力超空间的可行域, 由此开创了直接反演法的先河。尽管如此, 为了确保可行解域的存在, 方解石双晶数据不能经历多期构造变形, 也不能拥有较大的测量误差。这些因素在实际测量中往往是不可避免的, 进而导致线性规划算法应用的局限性。考虑到这些可能的因素, 他们引入了一个扩大可行域范围的松弛变量 ξ_i ($\xi_i \geq 0$), 将不等式(1)和(2)改写为:

$$\mathbf{m}_i \cdot \sigma_D \cdot \mathbf{n}_i \geq \tau_c - \xi_i \quad (6)$$

$$\mathbf{m}_i \cdot \sigma_D \cdot \mathbf{n}_i < \tau_c + \xi_i \quad (7)$$

其中 \mathbf{m}_i 和 \mathbf{n}_i 分别代表第 i 个双晶化或未双晶化 e-面法线方向和滑移方向的单位矢量。于是, 将古应力的求解转化成为一个最优化问题, 即最小化如下的目标函数:

$$f = \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (8)$$

其中 N 是双晶化或未双晶化 e-面的数目。同样地, 可采用线性规划算法求解该最优化问题。当 f 抵达最

小值时, 所获得的偏应力张量 σ_D 便是最优解。

后来, Laurent et al. (1990) 重新定义目标函数如下:

$$f(\sigma_D) = \sum_{i=1}^N f_i(\sigma_D)^2 \quad (9)$$

其中, 当第 i 个双晶化或未双晶化 e-面上的剪应力满足不等式(1)或(2)时, $f_i(\sigma_D)=0$; 反之, $f_i(\sigma_D)=|\tau_{si}-\tau_c|$ 。不难证明可用最小二乘法求解该目标函数的最小化问题, 极大方便了该问题的求解。

显然, 上述两个目标函数的最小化直接取决于不协调数据(如计算上未双晶化而实际上双晶化的 e-面与计算上双晶化而实际上未双晶化的 e-面)的存在, 而与协调数据(如计算上和实际上双晶化的 e-面与计算上和实际上未双晶化的 e-面)无关。这势必会影响到解的稳定性, 特别是当待求解的应力不能很好地分离出双晶化和非双晶化数据时, 从而极大地降低了这些方法的鲁棒性。因此, 为了得到稳定解, 通常需要在反演过程中剔除掉相当多的不协调数据。

3.2.2 Etchecopar 反演法

Etchecopar (1984) 借鉴了有关的断层擦痕反演方法(Etchecopar, 1981), 提出了一种利用双晶化 e-面数据求解简化应力张量的方法。所考虑的简化应力张量只有 4 个独立变量参数, 其中 3 个为主应力方向和 1 个为应力比 ϕ 。它具有以下的形式:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

在此构造应力下, 任一截面分解剪应力值 τ_s 的范围是 $[-0.5, 0.5]$ 。该简化应力张量与前述的偏应力张量 σ_D 之间关系如下:

$$\sigma_D = D \left[\sigma_0 - \frac{\phi+1}{3} \mathbf{I} \right] \quad (11)$$

其中 \mathbf{I} 为单位矩阵, D 为差应力 $(\sigma_1-\sigma_3)$ 。

令 τ_{sa} 是双晶化 e-面所需要的最小剪应力值, 作为理论上分开双晶化和未双晶化 e-面的界限点(图 5)。实际上, 经常会有一部分未双晶化的 e-面不满足这种关系, 即 $\tau_{sj} > \tau_{sa}$ (图 5)。为此, Etchecopar (1984) 定义如下的惩罚函数:

$$f = \sum_{j=1}^K (\tau_{sj} - \tau_{sa}) \quad (12)$$

其中 K 是不协调的未双晶化 e-面的数目。通过最小化该惩罚函数获得最佳的应力解。整个的求解过程分为两步。第一步, 随机选取大量(如 1000 个)的初始简化应力张量, 依次最小化惩罚函数, 然后从中

找出具有最小的惩罚函数最小化值, 所对应的应力解视为初步解。对于每个初始简化应力张量, 具体的计算流程如下: ①计算所有双晶化和未双晶化 e-面上的分解剪应力 τ_s ; ②找出双晶化 e-面上分解剪应力 τ_s 的最小值作为临界剪应力值 τ_{sa} ; ③当未双晶化 e-面上的 $\tau_s > \tau_{sa}$ (图 5a) 时, 该值被用来计算惩罚函数。第二步, 采用 Rosenbrock (1960) 快速非线性方法在获得的初步解附近进行局部搜索获得最优解。

与 Laurent et al. (1981, 1990) 的方法不同, 该方法只考虑到不协调的未双晶化 e-面。同样地, 惩罚函数的定义是针对不协调数据, 其最小化取决于不协调数据的存在, 因而可能会导致解的非鲁棒性。

3.2.3 Yamaji (2015) 反演法

上述的直接反演法具有明显的缺陷: 没有考虑到协调数据的存在 (Rez and Melichar, 2006)。考虑到整个数据中协调数据经常是超过半数的, 于是开始同时关注协调和不协调数据的百分比, 将其作为目标函数的内容。例如, Yamaji (2015) 的目标函数 $F(\bar{x})$ 定义如下:

$$F(\bar{x}) = I_t(D)n_t(\bar{x}) + I_u(D)n_u(\bar{x}) \quad (13)$$

其中 $n_t(\bar{x})$ 和 $n_u(\bar{x})$ 能被应力 \bar{x} 解释的双晶化和未双晶化数据的数量; $I_t(D)$ 和 $I_u(D)$ 是差应力值 D 的信息函数, 表示这两种数据约束应力的能力, 相当于 $n_t(\bar{x})$ 和 $n_u(\bar{x})$ 的权重。目标函数值越大, 说明数据能更好地约束应力, \bar{x} 就越接近真实值。

上式中, 该目标函数不再是连续的, 而是一种阶梯函数。这给直接求解其最大化问题带来难于克服的困难。搜索法是 Yamaji (2015) 选择的算法。他在五维单位应力空间里选出 60000 个均匀分布的单位应力向量 $\bar{\sigma}$ 和一系列差应力值 D , 然后逐一求解每个应力下的目标函数值, 从中找出最大值, 所对应的差应力 D_{opt} 和单位应力向量 $\bar{\sigma}_{opt}$ 为最佳的计算结果。搜索法具有相对低的精度, 取决于单位应力矢量和差应力值的间隔大小。一般地, 间隔越小, 精度就越高, 但计算量越大。

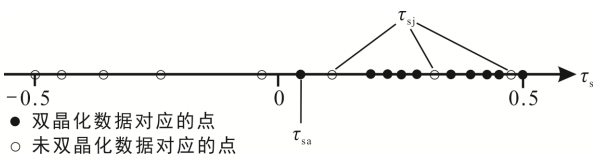


图 5 双晶化和未双晶化 e-面分类的示意图 (引自 Tournet and Laurent, 1990)

Fig.5 Schematic illustration for classification of the twinned and untwinned planes

4 影响因素

如上所述, 经过半个多世纪的发展, 已经提出了各种反演方解石 e-双晶的方法, 但是这并不意味着方解石 e-双晶的古应力分析法达到成熟的境界。任何不加分析地应用该方法往往有可能得到毫无意义的应力解。导致计算的应力解严重地偏离真实应力的因素很多, 与该方法的局限性和双晶数据本身有关。

4.1 方法的局限性

方解石 e-双晶的古应力分析离不开一些基本假设, 包括均匀分布的应力场或统一应力、小变形、一期构造变形和以双晶和滑移为主导的显微变形机制。当分析的样品不满足其中的一个或多个假设时, 所得到的应力解不可避免地会偏离真实的应力。这些假设决定了适用的对象只是低温、低围压下发生过一期轻微共轴变形的方解石集合体。实际上, 自然界中远离剪切带和没有再度遭受中、高温变形的样品 (如结晶灰岩、大理岩、方解石脉等) 基本上都满足除一期构造变形外的其他假设。需要说明的是, 传统的古应力分析法只能反演一期双晶数据, 而许多新近提出的古应力分析法可以处理多期双晶数据 (详见 5.2)。

4.2 双晶数据本身

与双晶数据有关的因素分为测量误差和数据结构两类。测量误差是指利用费氏台测量方解石光轴和双晶时产生的各种误差, 不仅有测量方法的准确度和角度刻度尺的精度甚至粗心的记录错误, 而且还包括因费氏台测量而产生的有偏数据。由于适用于古应力分析的双晶厚度很小, 通常小于 $5 \mu\text{m}$ (Ferrill, 1991), 加上费氏台 H 轴向东、西倾斜角度最大只能达 60° , 在费氏台下那些与薄片夹角很小的双晶化 e-面不容易被观察和测量, 因此会被误认为是未双晶化 e-面。根据 Yamaji (2015) 的计算结果, 这样会导致 20%~25% 的双晶化 e-面被忽略掉, 意味着很难通过反演这样有偏的数据来获得准确的应力差。实际操作中解决此问题的途径是, 在样品中制作定向的两个或三个正交薄片。这样可以确保具有不同产状的双晶化 e-面都可以被观察到, 但是无法弥补每个截面上被误判的未双晶化 e-面的存在。

数据结构包括双晶数据是均质的 (一期) 还是非均质的 (多期)、所有方解石 (双晶化和未双晶化) 的光轴是否均匀分布在方向空间中。前一个因素已有好的解决方案, 归功于处理多期双晶数据的古应力

分析方法的提出(详见 5.2)。相对而言,后一个因素没有引起足够的关注,虽然未双晶化方解石光轴的测量和分布型式的假设检验都不是什么难事。除了前面提到的假设外,方解石 e-双晶的古应力分析法还有一个隐含的假设:在方向空间中,所有的光轴呈均匀分布,或者方解石没有明显的结晶学取向。当光轴具有明显的取向时,在测量中遇到具有平行该方向的光轴的方解石 e-双晶的概率极大,最终所获得的双晶数据是有偏的。一个简单但极端的例子是拉张的方解石脉,它拥有与脉壁垂直的光轴极密。对于这样的数据,上述的任何方法都极有可能给出偏离真实情况的应力解。在此情形下如何校正双晶数据是迫切需要解决的问题。

此外,一些算法因自身而对数据结构有某种特殊要求。例如,基于不协调数据的直接反演法(如 Laurent et al., 1981, 1990; Etchecopar, 1984)都隐含地期望足够多的协调双晶化 e-面和协调未双晶化 e-面紧密地分布在应力解的两侧,从而确保解的稳定性。

5 展 望

方解石双晶的古应力分析方法作为一种显微尺度、有效的手段,已经得到广泛的应用,特别是在缺乏宏观构造、露头欠佳甚至定向岩心的情形下(Lacombe, 2010),因此具有某种不可替代性。鉴于多期双晶数据的普遍性,如何识别和反演多期双晶数据一直是古应力分析的焦点。然而,该方法目前的处境十分尴尬,因为用于测量方解石双晶的费氏台及其配套的光学显微镜早已停产,而有望取而代之的电子背散射衍射技术还存在不足。

5.1 数据获取

对于绝大多数构造地质学者而言,费氏台一直是获取方解石双晶数据的唯一工具。费氏台的使用是一项非常具有技巧性、耗时费事的手工活,需要操作者具有很扎实的专业知识,经过相对长时间的训练才能熟练掌握。众所周知,X射线衍射仪的普及使得费氏台不再像以前那样是研究晶体结构的必备工具。由于用户的大幅度减少,从 20 世纪 90 年代起,Zeiss、Leitz 等主要国际厂家均停止生产费氏台,随后专门用于安装费氏台的光学显微镜也不再生产(Kile, 2009)。国内大多数地质院校也因此早已不讲授费氏台的使用方法。这给方解石双晶测量带来接近毁灭性的打击。

近十余年来,电子背散射衍射技术(EBSD)被逐

渐地用来尝试测量方解石双晶(Rez et al., 2005; Parlangeau et al., 2015, 2016; 闫淑玉等, 2016),可望打破这种被动的局面。与费氏台相比,EBSD 的优点十分突出:它的自动化程度高,测量更为客观和精确,没有费氏台的较大测量误差和测量盲区。Parlangeau 等(2016)通过比较费氏台和 EBSD 技术测量的双晶数据反演的古应力结果,也证实了该技术获取双晶数据的可靠性。然而,由于可用于古应力反演的双晶类型的厚度通常小于 5 μm (Ferrill, 1991),且在应力场微弱的情形下每个方解石晶粒通常只发极少数双晶,而相应的晶粒尺寸却达数百微米到数毫米,因此如何选取合适的扫描步长是很关键的问题。如果步长选取过大则可能漏测双晶,而过小则会大大增加测量的时间,并浪费大量的测点。

当然,费氏台并不是完全过时的,其不可替代性有三:一是利用它能够观察在 EBSD 下一般不容易看到细小的方解石双晶纹;二是制做费氏台薄片在成本上远低于制作 EBSD 试样;三是所测量的就是所看到的,因而比 EBSD 的测量和解释更直接。

5.2 多期双晶数据的反演

由于长期的地质历史演化,地质体普遍遭受过复杂多变的构造应力作用,记录了多期构造变形。原理上,方解石双晶的古应力分析只能反演一期双晶数据,因而还不具有广泛的应用前景。如何将它拓展成具有处理多期双晶数据的普适性方法?这一直是古应力分析中富有挑战性的方向,其关键在于如何识别出多期双晶数据。现有的主要识别方法如下:

(1) 常规的古应力分析法: Etchecopar (1984)利用他文中提出的基于一期双晶数据的方法来处理多期双晶数据。当由该方法获得第一个应力解后,首先剔除掉协调的双晶化 e-面数据,但保留不协调的双晶化 e-面数据和所有的未双晶化数据,然后再采用该方法获得第二个应力解。如果数据许可的话,那么同样地可以得到第三个或更多的应力解。这种分离的前提是各期双晶数据(双晶化和未双晶化 e-面)在结构上具有好的可分性。当各期应力张量比较接近(Gagała, 2009)或差应力值足够大(Yamaji, 2015)时,相当部分的双晶化 e-面能同时被至少两期应力所解释,会大幅度地降低双晶数据的可分离性。另外,对于多期双晶数据,所测量到的未双晶化 e-面是每期应力共有的。换句话说,相对于一期双晶数据,这些数据是不完整的,因为完全没有包含与至少一期应力不协调的非双晶化 e-面。这样忽视相对的非双晶化 e-面必然会影响到多期双晶数据的识别

和古应力估计。

(2) 聚类分析: Nemcok et al. (1999)提出了一种适用于断层擦痕和方解石双晶的识别方法。该方法结合了前面提到的直二面角法和聚类分析法。它首先需要均匀地离散化单位应力空间(五维的)。对于每个双晶化 e-面,依次判断每个应力节点的最大主应力在立体投影网上是否落入由该数据限定的压缩区或拉张区,分别记为 1 或 0,表示将可能或不可能形成双晶化,于是得到反映解释该双晶化 e-面的应力分布情况的一维数组。然后,基于这样的超长数组,计算不同双晶化 e-面之间的相似函数,由此采用单链法(Everitt, 1980)进行分层聚类。他们规定当相似系数低于 0.8 时停止聚类,并不考虑所含数据低于阈值(如 15%)的分类。严格上讲,方解石双晶不等价于断层擦痕,由直二面角限定的最大主应力分布只能大致地反映适合双晶化的最大主应力分布,尤其是在差应力值很大的情形下。因此,有时会难以得到理想的聚类效果(Gagała, 2009)。

致谢: 衷心感谢加拿大蒙特利尔综合工学院嵇少丞教授对本文提出了宝贵的修改意见。

参考文献(References):

- 宋鸿林. 1982. 利用方解石的E双晶定主压应力轴方向的图解法. *地球科学*, 18(3): 179–188, 341.
- 闫淑玉, 张波, 张进江, 吴景富, 赵志刚. 2016. 基于EBSD技术利用方解石双晶恢复古应力方向的研究. *地质科技情报*, 35(4): 50–54.
- Angelier J. 1984. Tectonic analysis of fault slip data sets. *Journal of Geophysical Research Solid Earth*, 89(B7): 5835–5848.
- Angelier J. 1990. Inversion of field data in fault tectonics to obtain the regional stress III: A new rapid direct inversion method by analytical means. *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, 103(2): 363–376.
- Angelier J and Mechler P. 1977. Sur une méthode graphique de recherche des contraintes principales également utilisable en tectonique et en séismologie: La méthode des dièdres droits. *Bulletin de la Société Géologique de France*, S7–XIX(6): 1309–1318.
- Burgin H B, Amrouch K, Rajabi M, Kulikowski D and Holford S P. 2018. Determining paleo-structural environments through natural fracture and calcite twin analyses: A case study in the Otway Basin, Australia. *The APPEA Journal*, 58: 238–254.
- Burkhard M. 1993. Calcite twins, their geometry, appearance and significance as stress-strain markers and indicators of tectonic regime: A review. *Journal of Structural Geology*, 15(3): 351–368.
- Carter N L and Raleigh C B. 1969. Principal stress directions from plastic flow in crystals. *Geological Society of America Bulletin*, 80(7): 1231–1264.
- Dietrich D and Song H L. 1984. Calcite fabrics in a natural shear environment, the Helvetic nappes of western Switzerland. *Journal of Structural Geology*, 6(1–2): 19–32.
- Etchecopar A. 1984. Etude des états de contrainte en tectonique cassante et simulation de déformations plastiques (approche mathématique). Ph.D. thesis, University of Montpellier.
- Etchecopar A, Vasseur G and Daignieres M. 1981. An inverse problem in microtectonics for the determination of stress tensors from fault striation analysis. *Journal of Structural Geology*, 3(1): 51–65.
- Everitt B. 1980. Cluster Analysis. New York: Halsted Press (John Wiley): 1–136.
- Ferrill D A. 1991. Calcite twin widths and intensities as metamorphic indicators in natural low-temperature deformation of limestone. *Journal of Structural Geology*, 13(6): 667–675.
- Ferrill D A, Morris A P, Evans M A, Burkhard M, Groshong R H and Onasch C M. 2004. Calcite twin morphology: A low-temperature deformation geothermometer. *Journal of Structural Geology*, 26(8): 1521–1529.
- Gagała Ł. 2009. Reliability of selected procedures of stress inversion and data separation for inhomogeneous populations of calcite twins and striated faults: Insights from numerical experiments. *International Journal of Earth Sciences*, 98(2): 461–479.
- González-Casado J M and García-Cuevas C. 1999. Calcite twins from microveins as indicators of deformation history. *Journal of Structural Geology*, 21(7): 875–889.
- Griggs D, Turner F J, Borg I and Sosoka J. 1951. Deformation of Yule marble: Part IV—Effects at 150°C. *Geological Society of America Bulletin*, 62(12): 1385–1406.
- Groshong R H. 1972. Strain calculated from twinning in calcite. *Geological Society of America Bulletin*, 83(7): 2025–2037.
- Groshong R H, Teufel L W and Gasteiger C. 1984. Precision

- and accuracy of the calcite strain-gage technique. *Geological Society of America Bulletin*, 95(3): 357–363.
- Handin J W and Griggs D. 1951. Deformation of Yule marble: Part II. Predicted fabric changes. *Geological Society of America Bulletin*, 62(8): 863–886.
- Jamison W R and Spang J H. 1976. Use of calcite twin lamellae to infer differential stress. *Geological Society of America Bulletin*, 87(6): 868–872.
- Kile D E. 2009. The universal stage: The past, present, and future of a mineralogical research instrument. *Geochemical News*, 140: 1–21.
- Lacombe O. 2010. Calcite twins, a tool for tectonic studies in thrust belts and stable orogenic forelands. *Oil & Gas Science and Technology*, 65(6): 809–838.
- Lacombe O, Amrouch K, Mouthereau F and Dissez L. 2007. Calcite twinning constraints on late Neogene stress patterns and deformation mechanisms in the active Zagros collision belt. *Geology*, 35(3): 263–266.
- Lacombe O, Angelier J, Laurent P, Bergerat F and Tourneret C. 1990. Joint analyses of calcite twins and fault slips as a key for deciphering polyphase tectonics: Burgundy as a case study. *Tectonophysics*, 182(3): 279–300.
- Laurent P, Bernard P, Vasseur G and Etchecopar A. 1981. Stress tensor determination from the study of e twins in calcite: A linear programming method. *Tectonophysics*, 78(1–4): 651–660.
- Laurent P, Tourneret C and Laborde O. 1990. Determining deviatoric stress tensors from calcite twins: Applications to monophased synthetic and natural polycrystals. *Tectonics*, 9(3): 379–390.
- Nemcek M, Dusan K and Lisle R J. 1999. A stress inversion procedure for polyphase fault/slip data sets. *Journal of Structural Geology*, 21: 597–611.
- Nissen H U. 1964. Dynamic and kinematic analysis of deformed crinoid stems in a quartz graywacke. *Journal of Geology*, 72(3): 346–360.
- Parlangeau C, Lacombe O, Brisset F, Kohler E, Daniel J M and Schueller S. 2015. Inversion of calcite twin data for stress (2): EBSD as a tool for data measurements. *EGU, Geophysical Research Abstracts*, 17: 4829.
- Parlangeau C, Lacombe O, Schueller S and Daniel J M. 2016. New inversion of calcite twin data for paleostress tested and calibrated on numerically-generated and natural data. *EGU, Geophysical Research Abstracts*, 18: 15511.
- Pfiffner O A and Burkhard M. 1987. Determination of paleo-stress axes orientations from fault, twin and earthquake data. *Annales Tectonicae*, 1: 48–57.
- Rez J and Melichar R. 2006. The black box of stress analysis based on calcite twinning. *Geolines*, 20: 115.
- Rez J, Melichar R, Poelt P, Mitsche S and Kalvoda J. 2005. Calcite twinning stress inversion using OIM (EBSD) data. *Geolines*, 19: 100–101.
- Rocher M, Cushing M, Lemeille F, Lozach Y and Angelier J. 2004. Intraplate paleostresses reconstructed with calcite twinning and faulting: Improved method and application to the eastern Paris Basin (Lorraine, France). *Tectonophysics*, 387(1–4): 1–21.
- Rocher M, Lacombe O, Angelier J and Chen H W. 1996. Mechanical twin sets in calcite as markers of recent collisional events in a fold-and-thrust belt: Evidence from the reefal limestones of southwestern Taiwan. *Tectonics*, 15(5): 984–996.
- Rocher M, Lacombe O, Angelier J, Deffontaines B T and Verdier F. 2000. Cenozoic folding and faulting in the south Aquitaine Basin (France): Insights from combined structural and paleostress analyses. *Journal of Structural Geology*, 22(5): 627–645.
- Rosenbrock H H. 1960. An automatic method for finding the greatest or least value of a function. *Computer Journal*, 3(3): 175–184.
- Rowe K and Rutter E. 1990. Palaeostress estimation using calcite twinning: Experimental calibration and application to nature. *Journal of Structural Geology*, 12(1): 1–17.
- Schedl A. 2006. Applications of twin analysis to studying meteorite impact structures. *Earth and Planetary Science Letters*, 244(3–4): 530–540.
- Spang J H. 1972. Numerical method for dynamic analysis of calcite twin lamellae. *Geological Society of America Bulletin*, 83(2): 467–471.
- Turneret C and Laurent P. 1990. Paleo-stress orientations from calcite twins in the North Pyrenean foreland, determined by the Etchecopar inverse method. *Tectonophysics*, 180(2–4): 287–302.
- Tripathy V and Saha D. 2015. Inversion of calcite twin data, paleostress reconstruction and multiphase weak deformation in cratonic interior — Evidence from the Proterozoic Cuddapah basin, India. *Journal of Structural Geology*, 77: 62–81.
- Turner F J. 1953. Nature and dynamic interpretation of deformation lamellae in calcite of three marbles. *American Journal of Science*, 251(4): 276–298.

Turner F J, Griggs D T and Heard H. 1954. Experimental deformation of calcite crystals. *Geological Society of America Bulletin*, 65(9): 883–934.

Yamaji A. 2015. Generalized Hough transform for the stress inversion of calcite twin data. *Journal of Structural Geology*, 80: 2–15.

Paleostress Analyses of Calcite e-twins: Theory and Prospect

ZHENG Jian^{1,2,3} and SHAN Yehua^{1,3*}

(1. CAS Key Laboratory of Ocean and Marginal Sea Geology, Guangzhou Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, Guangdong, China; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; 3. Institute of Earth Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

Abstract: Calcite e-twin is a kind of low-temperature intracrystalline plasticity mechanism, which is commonly developed in sparitic limestone and marble. The principle of paleostress analyses related to e-twin is elucidated because the close relationship between twinning and crustal stress, and two kinds of analytical methods, graphical method and inversion method, were put forward in this contribution. Through paleostress analyses of calcite e-twin, we can obtain the orientation of principal stress, the stress ratio and even the absolute differential stress. Therefore, this method can be widely used in paleostress analyses of Craton basin, foreland basin, and fold-and-thrust belts, where host rock deformation is weak. In this paper, we briefly reviewed the research history of paleostress analyses of calcite e-twin, summarized the principles of graphic and inversion methods, then evaluated the possible factors (the limitations of the method and the quality of the data) affecting the accuracy of these methods, and lastly, two aspects of data acquisition and inversion of polyphase data are proposed for further study.

Keywords: calcite e-twin; paleostress analyses; graphic method; inversion method; polyphase data

《大地构造与成矿学》2020年（第44卷）第2期预目 (2020年4月15日出版发行)

- 岩石大地构造学说的兴起、没落与新生……………张旗,李明超,陈万峰,金维浚,焦守涛,刘欣雨,韩帅
地质大数据分析的若干工具与应用
……………周永章,陈川,张旗,肖凡,沈文杰,卞静,王亚,杨威,焦守涛,刘艳鹏,韩枫
大数据挖掘与智能预测找矿靶区实验研究——卷积神经网络模型的应用……………刘艳鹏,朱立新,周永章
耦合颜色和纹理特征的矿物图像数据深度学习模型与智能识别方法……………李明超,刘承照,张野,朱月琴
全球岩浆岩在哈克图解中的自然分布初探
……………张昌振,张旗,刘学龙,杨帆,王帅帅,罗应,李振焕,陈建航,杨富成
胶东焦家断裂带蚀变岩非镜像对称特征及其地质意义
……………张亮亮,马生明,朱立新,林少一,周明岭,徐忠华,王建
基于随机森林算法的大尹格庄金矿床三维成矿预测……………陈进,毛先成,刘占坤,邓浩
基于成矿条件数值模拟和支持向量机算法的深部成矿预测——以粤北凡口铅锌矿为例
……………王语,肖凡,周永章,王俊,王恺其,余晓彤
基于金矿规格单元数据的机器学习方法在成矿建模分析中的应用
……………张野,李明超,韩帅,任秋兵,朱月琴