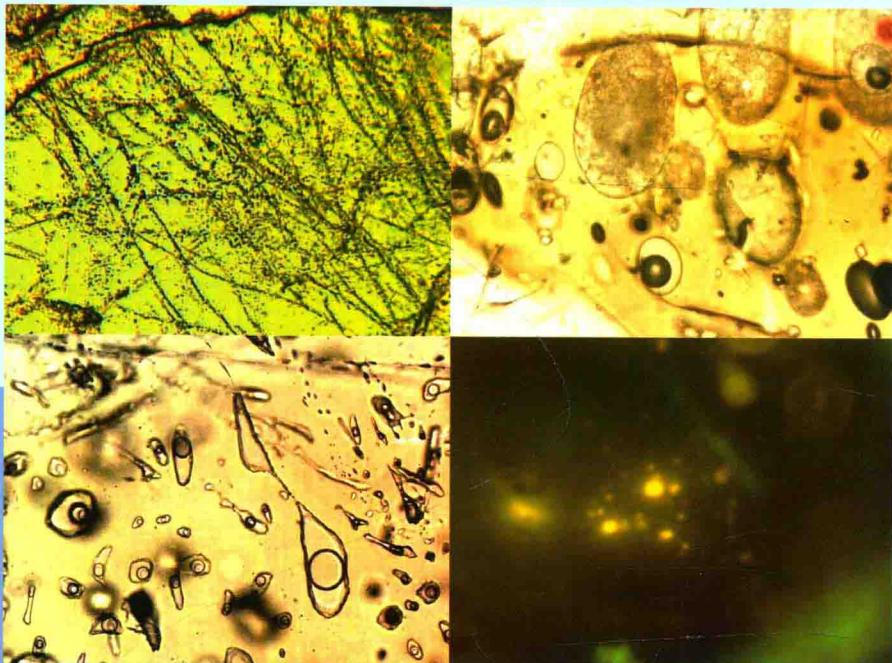


/包/裹/体/专著系列

# 流体包裹体 测定计算和分析

(上)

刘斌 著



科学出版社

流体包裹体专著系列

# 流体包裹体测定计算和分析

(上)

刘斌著

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书是作者在吸收多年来国内外流体包裹体研究精华的基础上，总结流体包裹体最新研究成果编写而成。本书分为三个部分，第一部分为测定篇，主要介绍流体包裹体测定和计算的基本热力学原理；显微测温、成分分析和年龄测定的基本方法；盐度测定；简单体系流体包裹体的热力学参数测定和计算；气体水合物测定和复杂体系流体包裹体的热力学参数测定和计算。第二部分为计算篇，主要介绍流体包裹体捕获条件下热力学参数计算方法，包括形成温度、压力、熔体活度、流体逸度、氧逸度、水溶液 pH 和 Eh 等；不混溶流体包裹体特征和三种类型不混溶流体包裹体组合的判别、鉴别和计算；烃类(油气)包裹体均一化和捕获时热力学条件的计算；流体包裹体动力学条件计算；流体包裹体迹面表征参数的测定、断层应力参数分析和构造应力场的数值模拟。第三部分为分析篇，主要介绍有限元分析在流体包裹体中的应用；分形理论和流体包裹体迹面分维测定；小波分析在流体包裹体中的应用；人工神经网络系统分析在流体包裹体中的应用。

本书可作为流体包裹体研究、测试人员的使用手册，也可供从事地球科学领域的工作者和技术人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

流体包裹体测定计算和分析(上) / 刘斌著. —北京：科学出版社，2018  
(流体包裹体专著系列)

ISBN 978-7-03-057021-5

I. ①流… II. ①刘… III. ①流体包裹体—测定法 IV. ①P572

中国版本图书馆CIP数据核字(2018)第054627号

责任编辑：耿建业 陈姣姣 / 责任校对：王 瑞

责任印制：师艳茹 / 封面设计：耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

<http://www.sciencep.com>

艺堂印刷(天津)有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2018 年 6 月第 一 版 开本：720 × 1000 1/16

2018 年 6 月第一次印刷 印张：25 1/4

字数：498 000

定价：198.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

# 序

流体包裹体作为地质过程中保存下来的原始流体样品，已成为一种有效的微观研究手段为国内外学者所公认，多年来得到了长足的发展，并且一直是地质研究中的热点。

近年来，由于现代科学技术的引进和发展，尤其是在信息领域的飞跃发展，流体包裹体出现了不少新的动向：研究内容的深入、研究范围的扩大、研究手段的扩展、研究的量化和时空的开拓、学科交叉与渗透的加强、现代学科的应用、数值处理和电脑计算的深入，流体包裹体已成为地质基础研究工作的必要部分，在地质学领域日益显示出其独特的和不可替代的作用。

作者从事流体包裹体研究 40 多年，根据多项国家自然科学基金和其他研究课题，结合国内外研究成果，作者编写出《流体包裹体测定计算和分析(上)、(下)》专著。该专著的主要特点如下：

(1)吸收多年来国内外流体包裹体研究成果，为以往研究精华的总结。所有内容均有实例来阐明计算过程，便于读者了解这些图表和公式的来源，能够准确、熟练地计算并应用。

(2)重点介绍四个方面的计算方法：①流体包裹体捕获条件下热力学参数计算；②多种类型不混溶流体包裹体组合的测定、鉴别和计算；③油气(烃类)包裹体均一化和捕获时热力学条件的计算；④构造流体包裹体动力学条件和流体包裹体迹面应力学参数的计算。

(3)探索现代数学分析在流体包裹体中的应用，主要包括：有限元分析；分形理论和分维测定；小波分析；人工神经网络系统分析。

(4)计算软件的编制。为了有效、快速地进行计算，对该书所用到的计算方法，全部编制了判别软件和计算软件，为使用者提供方便。

在这个信息化、大数据、云计算、互联网时代，流体包裹体的研究必须紧跟时代的步伐，该书的出版将会为流体包裹体科学进一步的发展起到促进作用！

卢焕章 教授

2016 年 8 月于加拿大魁北克大学

## 前　　言

流体包裹体描述和测定已有 100 多年的历史，由于当时科学技术水平的限制，没有得到长足的发展。20 世纪七八十年代，由于引进现代热力学理论，流体包裹体测定和计算取得了较大的成就。它应用现代流体热力学原理，测定和探索自然界地质体或人工合成材料中显微缺陷所包裹的流体介质的性质，从而进一步计算和研究它们生成时的热力学条件。此时流体包裹体真正成为一门新兴的分支学科。

现代平衡热动力学大大地推动了流体包裹体理论和应用的发展。许多流体包裹体研究者应用自然界常见组分体系的相图，成功地解释了许多过去难以解释的地质现象，定量地计算出了地质过程中某些热力学参数，为阐明地质作用和地质体成因，提供了可靠的数值基础。一些国外学者对自然界中包裹体所涉及的主要流体成分体系进行了大量实验和研究，得到了更为精确的相图，修改和建立了更为适用而精确的流体状态方程；与此同时，流体包裹体热力学参数的计算软件相继出现，这些软件能方便、快速、准确地计算出流体包裹体热力学参数，流体包裹体测定仪器不断更新、检测范围不断扩大、分析精确度不断提高，将流体包裹体研究和应用提高到了一个新的水平。

1999 年作者根据当时国内外流体包裹体论文内容分散的缺点，为了弥补没有一本系统计算流体包裹体热力学参数的专著，编写出版了《流体包裹体热力学》。近 20 年来，流体包裹体研究又有很大进展：新的相图相继出现，状态方程越来越精确，测定仪器越来越先进，计算软件不断更新，研究领域不断扩大，研究内容不断深入。为了总结近 20 年来的研究成果，根据作者主持的多项国家自然科学基金和其他研究课题，并结合国内外研究成果，编写了《流体包裹体测定计算和分析》专著，本书分为上、下两册出版。

本书分为三个部分。

第一部分为测定篇，主要介绍流体包裹体形成的基本原理；有关的相平衡和所属体系相态特征；流体包裹体研究的热力学基础；显微测温原理和成分体系的估测；流体包裹体盐度的测定；气体水合物特征及其在流体包裹体测定方面的应用；流体包裹体成分和年龄测定；简单体系流体包裹体体积、密度等参数的测定和计算；含多组分挥发分盐水溶液包裹体体积、密度等参数的计算。

第二部分为计算篇，主要介绍流体包裹体及其主矿物共生平衡形成温度和压力计算；流体包裹体逸度和氧逸度的计算；水溶液包裹体离子反应及其 pH、

Eh 的计算；熔体包裹体热力学条件的计算；不混溶流体包裹体组合特征和三种类型不混溶流体包裹体组合的测定、鉴别与计算；烃类(油气)包裹体均一化和捕获时热力学条件的计算；流体包裹体热动力学参数的计算；流体包裹体迹面表征参数的测定、断层应力参数分析和构造应力场的数值模拟。

第三部分为分析篇，主要介绍有限元分析、分形理论和分维测定、小波分析、人工神经网络系统分析在流体包裹体中的应用。

本书有如下特点：

## 1. 学术创新方面

### 1) 包裹体热力学计算创新方面

(1) 突破流体包裹体单一体系，结合周围相关体系，在统一热力学场下进行研究，建立包裹体捕获条件下温度和压力的计算方法；推导出适合流体包裹体的流体逸度、氧逸度、熔体包裹体活度、水溶液包裹体 pH 和 Eh 参数计算公式。

(2) 根据复杂成分不混溶流体包裹体特征，提出“不混溶流体包裹体组合”和“端元组分包裹体”的概念，建立成分不同的不混溶流体包裹体组合的具体鉴别方法和计算公式。

(3) 根据“虚拟组分”概念和“局域平衡假设”，采用“相平衡常数”和“相态方程”原理，建立复杂油气包裹体具体的数学模型，提供精确计算油气包裹体捕获温度、压力、流体密度、体积等热力学参数的方法。

(4) 为了进行有效、快速的计算，编制了复杂烃类单个包裹体和复杂烃类不混溶包裹体组合的判别软件和形成热动力学参数的计算软件，并解决这一方面的计算难题。

### 2) 包裹体动力学计算创新方面

(1) 利用单一盐水包裹体计算包裹体捕获温度和压力。

(2) 利用流体包裹体等容式和地层温度(压力)梯度式计算包裹体捕获温度和压力。

(3) 古地层剥蚀厚度的计算。

(4) 包裹体流体势的计算。

### 3) 流体包裹体迹面应力学计算创新方面

探索流体包裹体迹面与构造应力的动力学关系，建立流体包裹体迹面构建构造应力场数学模型，为流体包裹体迹面提供另一种新构造分析方法。

## 2. 内容先进性方面

(1) 本书在吸收以往研究精华的基础上，还总结近年来国内外流体包裹体最新研究成果。应用于不同地质环境捕获的流体包裹体和各种构造环境形成的流体包裹体迹面测定和计算。

(2) 现代互联网时代和信息技术的发展，流体包裹体测定数据急剧增加，如

何从海量数据中提取合适的信息成为当务之急，数值处理就是为顺应这种需要而发展起来的处理技术。本书主要包括有限元分析、分形理论和分维测定、小波分析、人工神经网络系统分析先进的现代数据处理方法在流体包裹体中的应用。与此同时，在一定情况下，两种方法相结合，往往可以获得更好的效果。

### 3. 结构体系方面

(1) 全书分为三部分，第一部分简要介绍流体包裹体测定原理和测定方法，列出大量相图、图表和公式；第二部分介绍流体包裹体均一化和捕获时热力学和动力学参数的计算方法；第三部分利用现代数学方法进行流体包裹体分析的新尝试，目前还没有这方面的论文发表，具有时代的新信息。

(2) 具有理论基础与实际应用有机结合的特点，从理论上引用和推导许多实用计算模型，所有内容均有实例来阐明计算过程，便于读者了解这些图表和公式的来源，能够准确、熟练地计算并应用。

### 4. 实际应用方面

为了有效、快速地进行计算，作者除推荐国内外许多优秀计算软件外，对本书所涉及的计算方法，全部编制了判别软件和计算软件，即使不熟悉计算软件的专业工作者，也能够方便使用。

人类正在进入移动加大、数据加大、网络加云计算的“移、大、云”时代，大数据正日益成为国家基础性战略资源。海量数据的挖掘、分析、应用，预示着新一波改革的浪潮即将席卷而来。为了更好地迎战此次大数据浪潮的冲击，不断提升大数据应用价值。如果本书的出版能为流体包裹体进一步的发展起到抛砖引玉的作用，本人就感到欣慰了！

由于本书内容多、涉及面广，由于本人知识面有限，特别是对现代数学了解还不太深入，难免存在不妥之处，敬请读者指正。

刘　斌

2017年8月于上海同济苑

# 目 录

序

前言

(上)

## 测 定 篇

|                                      |     |
|--------------------------------------|-----|
| <b>第 1 章 流体包裹体形成机制、相态特征和有关的热力学性质</b> | 3   |
| 1.1 流体包裹体定义、形成机制和分类                  | 3   |
| 1.1.1 流体包裹体定义                        | 3   |
| 1.1.2 流体包裹体形成机制                      | 3   |
| 1.1.3 流体包裹体分类                        | 5   |
| 1.2 流体包裹体有关的相平衡和所属体系相态特征             | 6   |
| 1.2.1 相平衡和相律                         | 6   |
| 1.2.2 相图                             | 7   |
| 1.2.3 最常见无机成分体系流体包裹体的相态特征            | 9   |
| 1.3 流体包裹体研究的热力学基础                    | 38  |
| 1.3.1 流体包裹体研究的三个基本前提                 | 38  |
| 1.3.2 流体包裹体等容线                       | 39  |
| 1.3.3 流体包裹体常用的状态方程                   | 45  |
| 主要参考文献                               | 85  |
| <b>第 2 章 流体包裹体显微测温原理、成分分析和年龄测定</b>   | 90  |
| 2.1 流体包裹体显微测温原理                      | 90  |
| 2.1.1 包裹体捕获后的相变行为                    | 90  |
| 2.1.2 均一化测温的相变特征                     | 91  |
| 2.1.3 冷冻法测温的相变特征                     | 95  |
| 2.2 流体包裹体成分分析                        | 99  |
| 2.2.1 成分分析概述                         | 99  |
| 2.2.2 成分分析方法                         | 100 |
| 2.2.3 包裹体离子成分分析总结和展望                 | 101 |
| 2.2.4 包裹体成分分析流程                      | 101 |
| 2.3 流体包裹体稳定同位素分析                     | 102 |

|  |            |
|--|------------|
| 2.4 流体包裹体绝对年龄测定 .....  | 103        |
| 2.4.1 流体包裹体的 Rb、Sr 同位素年龄测定 .....   | 104        |
| 2.4.2 流体包裹体 $^{40}\text{Ar}$ 、 $^{39}\text{Ar}$ 同位素年龄测定 .....  | 104        |
| 主要参考文献 .....   | 107        |
| <b>第 3 章 流体包裹体盐度的测定和计算 .....</b>   | <b>110</b> |
| 3.1 盐水 ( $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}$ ) 包裹体 .....  | 110        |
| 3.1.1 低盐度 ( $0 \sim 23.3\% \text{NaCl}$ ) 水溶液包裹体 .....   | 110        |
| 3.1.2 中等盐度 ( $23.3\% \sim 26.3\% \text{NaCl}$ ) 水溶液包裹体 .....   | 113        |
| 3.1.3 高盐度 ( $> 26.3\% \text{NaCl}$ , 含有 $\text{NaCl}$ 子矿物) 的水溶液包裹体 .....   | 114        |
| 3.2 其他盐水 ( $\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{CaCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{MgCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ ) 包裹体 ..... | 116        |
| 3.2.1 图表计算法 .....  | 116        |
| 3.2.2 计算公式 .....   | 118        |
| 3.3 $\text{NaCl}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体 .....  | 122        |
| 3.4 $\text{NaCl}-\text{CaCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体 .....   | 126        |
| 3.4.1 $\text{NaCl}-\text{CaCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ 体系包裹体相变特征 .....   | 126        |
| 3.4.2 $\text{NaCl}-\text{CaCl}_2-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体测定计算 .....   | 128        |
| 3.5 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$ 包裹体 .....   | 130        |
| 3.5.1 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$ 包裹体相变特征 .....   | 130        |
| 3.5.2 $\text{NaCl}-\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体测定计算 .....   | 134        |
| 3.6 其他三元盐水溶液包裹体 .....  | 135        |
| 主要参考文献 .....   | 136        |
| <b>第 4 章 简单体系流体包裹体体积、密度等参数的测定和计算 .....</b>   | <b>138</b> |
| 4.1 测定和计算方法概述 .....  | 138        |
| 4.1.1 方法概述 .....   | 138        |
| 4.1.2 单组分体系流体包裹体一般计算方法 .....   | 140        |
| 4.1.3 两组分及多组分流体包裹体一般计算方法 .....   | 143        |
| 4.2 $\text{H}_2\text{O}$ 包裹体 .....   | 143        |
| 4.2.1 $\text{H}_2\text{O}$ 包裹体密度的计算 .....  | 143        |
| 4.2.2 $\text{H}_2\text{O}$ 包裹体体积的计算 .....  | 146        |
| 4.2.3 $\text{H}_2\text{O}$ 包裹体均一压力的计算 .....  | 147        |
| 4.3 $\text{CO}_2$ 包裹体 .....  | 147        |
| 4.3.1 $\text{CO}_2$ 包裹体密度的计算 .....   | 147        |
| 4.3.2 $\text{CO}_2$ 包裹体体积的计算 .....   | 151        |
| 4.3.3 $\text{CO}_2$ 包裹体均一压力的计算 .....   | 151        |
| 4.4 $\text{CH}_4$ 包裹体 .....  | 151        |
| 4.4.1 $\text{CH}_4$ 包裹体密度的计算 .....   | 151        |

|   |     |
|---|-----|
| 4.4.2 $\text{CH}_4$ 包裹体体积的计算                                      | 155 |
| 4.4.3 $\text{CH}_4$ 包裹体均一压力的计算                                    | 155 |
| 4.5 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}$ 及其他盐水包裹体                     | 155 |
| 4.5.1 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体密度的计算                   | 155 |
| 4.5.2 $\text{H}_2\text{O}-\text{NaCl}$ 及其他盐水包裹体                   | 161 |
| 4.5.3 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体均一压力的计算                 | 162 |
| 4.6 $\text{CO}_2-\text{CH}_4(\text{N}_2)$ 包裹体                     | 163 |
| 4.6.1 测定和计算的相变分析基础  | 163 |
| 4.6.2 流体体积、组成等参数的测定和计算  | 168 |
| 4.6.3 $\text{CO}_2-\text{N}_2$ 及其他体系                              | 174 |
| 4.7 $\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}$ 体系                           | 176 |
| 4.7.1 包裹体相变分析和测定的热力学前提  | 176 |
| 4.7.2 $\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体密度和体积的相图投影法             | 179 |
| 4.7.3 $\text{CO}_2-\text{H}_2\text{O}$ 包裹体密度和体积的计算法               | 184 |
| 4.7.4 计算程序框图  | 190 |
| 4.7.5 计算实例  | 191 |
| 4.8 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$ 包裹体              | 192 |
| 4.8.1 测定的热力学前提和计算的基本公式  | 192 |
| 4.8.2 密度和体积的相图投影法   | 194 |
| 4.8.3 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$ 包裹体密度和体积的精确计算法 | 197 |
| 4.8.4 计算步骤  | 199 |
| 4.8.5 程序框图  | 201 |
| 4.8.6 计算实例  | 202 |
| 4.9 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{CH}_4$ 包裹体              | 203 |
| 4.9.1 溶解度方程计算含挥发分盐水包裹体体积和密度的原理                                    | 203 |
| 4.9.2 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{CH}_4$ 体系包裹体溶解度方程式    | 204 |
| 4.9.3 $\text{NaCl}-\text{H}_2\text{O}-\text{CH}_4$ 体系包裹体状态方程式     | 204 |
| 4.9.4 计算步骤  | 206 |
| 4.9.5 计算程序框图  | 211 |
| 4.10 计算实例   | 211 |
| 主要参考文献  | 212 |
| <b>第 5 章 含多种挥发分盐水溶液包裹体体积、密度等参数的计算</b>                             | 214 |
| 5.1 气体水合物特征   | 215 |
| 5.1.1 气体水合物生成的热力学条件   | 215 |
| 5.1.2 气体水合物的相态平衡曲线  | 216 |
| 5.1.3 烷烃气体水合物的 $p-T$ 稳定曲线和某温度范围的经验公式                              | 219 |

|                                       |     |
|---------------------------------------|-----|
| 5.2 气体水合物的拓扑图、测定过程中相态变化               | 220 |
| 5.2.1 气体水合物的拓扑图                       | 220 |
| 5.2.2 包裹体中气体水合物测定过程中相态变化              | 222 |
| 5.3 气体水合物生成条件预测——气体水合常数计算             | 226 |
| 5.3.1 混合气体水合常数 $K_i$                  | 226 |
| 5.3.2 混合气体水合物特征                       | 226 |
| 5.3.3 气体水合常数计算公式                      | 227 |
| 5.3.4 包裹体中气体水合物的稳定温度、压力计算实例           | 230 |
| 5.4 利用气体水合物测定数值计算水溶液包裹体的含盐度           | 233 |
| 5.4.1 有关含盐度的图表                        | 233 |
| 5.4.2 根据气体水合物最后熔化温度确定含挥发分盐水包裹体的含盐度    | 239 |
| 5.4.3 几种水溶液包裹体的含盐度计算公式                | 242 |
| 5.5 含挥发分盐水包裹体密度和体积计算原理                | 244 |
| 5.5.1 相平衡常数和相态方程计算方法概述                | 244 |
| 5.5.2 含挥发分盐水包裹体密度和体积计算假设和定义           | 245 |
| 5.6 挥发分相态充填度计算法                       | 246 |
| 5.6.1 挥发分相态充填度计算方法概述                  | 246 |
| 5.6.2 计算步骤                            | 247 |
| 5.6.3 计算框图                            | 249 |
| 5.6.4 计算实例                            | 252 |
| 5.7 包裹体完全均一温度( $T_b$ )测定计算法           | 253 |
| 5.7.1 含多种挥发分盐水包裹体完全均一温度( $T_b$ )计算法原理 | 253 |
| 5.7.2 具体计算步骤                          | 253 |
| 5.7.3 计算程序框图                          | 255 |
| 5.7.4 计算实例                            | 257 |
| 5.8 挥发分相态充填度和包裹体完全均一温度同时测定计算法         | 257 |
| 5.8.1 概述                              | 257 |
| 5.8.2 计算步骤                            | 258 |
| 5.8.3 计算程序框图                          | 258 |
| 5.8.4 计算实例                            | 258 |
| 主要参考文献                                | 260 |

## 计 算 篇

|                             |     |
|-----------------------------|-----|
| 第6章 流体包裹体及其主矿物共生平衡形成温度和压力计算 | 269 |
| 6.1 流体包裹体与主矿物共生平衡热力学基础      | 269 |
| 6.1.1 形成温度和压力热力学计算原理        | 269 |

|  |            |
|--|------------|
| 6.1.2 形成温度和压力热力学计算方法.....                                  | 272        |
| 6.2 流体与主矿物不发生反应时的计算.....                                   | 276        |
| 6.2.1 流体包裹体状态方程与纯结晶主矿物单变平衡热力学方程联立的计算 .....                 | 276        |
| 6.2.2 流体包裹体状态方程与主矿物(固溶体)单变平衡热力学方程<br>联立的计算 .....           | 281        |
| 6.2.3 流体包裹体状态方程与矿物温度计、压力计联立的计算.....                        | 287        |
| 6.3 流体与主矿物发生反应时的计算.....                                    | 288        |
| 6.3.1 包裹体纯组分理想气体或液体参与矿物反应时的计算 .....                        | 289        |
| 6.3.2 包裹体纯组分实际气体或液相参与矿物反应时的计算 .....                        | 292        |
| 6.3.3 包裹体混合气体或液相参与矿物反应时的计算 .....                           | 294        |
| 6.4 自然界主要体系流体包裹体与矿物共生平衡热力学参数计算<br>软件——Visual Basic 程序..... | 298        |
| 主要参考文献.....  | 299        |
| <b>第 7 章 流体包裹体逸度和氧逸度的计算.....</b>                           | <b>300</b> |
| 7.1 流体包裹体逸度的计算.....  | 300        |
| 7.1.1 流体包裹体逸度的基本概念 .....                                   | 300        |
| 7.1.2 流体逸度和逸度系数定义式 .....                                   | 302        |
| 7.1.3 逸度系数计算方法 .....                                       | 303        |
| 7.1.4 混合物逸度计算.....   | 305        |
| 7.2 流体包裹体逸度的简化计算.....                                      | 309        |
| 7.2.1 流体包裹体逸度简化计算公式的推导 .....                               | 309        |
| 7.2.2 流体包裹体逸度系数公式 .....                                    | 309        |
| 7.2.3 流体包裹体逸度计算实例 .....                                    | 312        |
| 7.3 流体包裹体氧逸度的计算.....                                       | 314        |
| 7.3.1 流体包裹体氧逸度公式推导 .....                                   | 315        |
| 7.3.2 含氧化学反应的逸度平衡常数( $K_f$ ) .....                         | 318        |
| 7.3.3 流体包裹体氧逸度计算公式 .....                                   | 321        |
| 7.3.4 公式误差 .....   | 331        |
| 7.3.5 计算实例 .....   | 332        |
| 主要参考文献.....  | 336        |
| <b>第 8 章 水溶液包裹体中 pH、Eh 的计算.....</b>                        | <b>338</b> |
| 8.1 包裹体中不同离子反应类型和四种类型离子反应平衡热力学计算 .....                     | 338        |
| 8.1.1 离子水溶液反应类型 .....                                      | 338        |
| 8.1.2 四种类型离子反应平衡热力学计算 .....                                | 338        |
| 8.2 简单体系水溶液包裹体 pH 和 Eh 计算式的推导和计算实例 .....                   | 345        |
| 8.2.1 pH 计算式 .....   | 345        |

|   |     |
|---|-----|
| 8.2.2 Eh 计算式  | 353 |
| 8.2.3 应用注意事项  | 356 |
| 8.2.4 计算实例  | 357 |
| 主要参考文献  | 360 |
| <b>第 9 章 熔体包裹体活度方程在岩浆热力学平衡计算中的应用</b>                  | 363 |
| 9.1 硅酸盐熔体热力学特征  | 363 |
| 9.2 硅酸盐熔体活度-成分关系式                                     | 365 |
| 9.3 熔体活度反应  | 368 |
| 9.3.1 常见的熔体活度反应                                       | 368 |
| 9.3.2 特定组分活度反应  | 369 |
| 9.3.3 压力对熔体组分活度的效应                                    | 371 |
| 9.4 熔体 $\text{SiO}_2$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 活度方程式 | 373 |
| 9.4.1 缓冲剂反应和活度方程式                                     | 373 |
| 9.4.2 压力对活度的影响  | 375 |
| 9.4.3 温度对活度的影响  | 376 |
| 9.5 熔体包裹体活度方程在岩浆热力学计算中的应用                             | 377 |
| 9.5.1 热力学条件计算方法                                       | 377 |
| 9.5.2 计算实例  | 378 |
| 主要参考文献  | 381 |

(下)

|                                   |     |
|-----------------------------------|-----|
| <b>第 10 章 不混溶流体包裹体特征和热力学参数的计算</b> | 383 |
| 10.1 流体的不混溶性、不混溶流体包裹体组合及其类型       | 383 |
| 10.1.1 流体的不混溶性                    | 383 |
| 10.1.2 不混溶性流体包裹体组合及其类型            | 385 |
| 10.2 不混溶流体包裹体捕获时的状态和它们的组合特征       | 389 |
| 10.2.1 不混溶流体包裹体捕获时的状态             | 389 |
| 10.2.2 不混溶流体包裹体组合特征               | 390 |
| 10.3 不混溶流体限定的热力学条件                | 391 |
| 10.3.1 一元体系                       | 391 |
| 10.3.2 二元体系                       | 392 |
| 10.3.3 三元体系                       | 399 |
| 10.4 不混溶包裹体组合的鉴别方法                | 399 |
| 10.4.1 显微镜观察鉴别                    | 400 |
| 10.4.2 显微冷热台中均一法鉴别                | 402 |
| 10.4.3 热力学数值计算法                   | 402 |

|  |            |
|--|------------|
| 10.5 不混溶流体包裹体捕获温度和压力的计算 .....  | 417        |
| 10.5.1 “端元组分包裹体”的概念、类型及其在不混溶流体包裹体组合温度<br>和压力计算中的应用 .....                   | 417        |
| 10.5.2 纯组分不混溶流体包裹体组合的计算 .....  | 418        |
| 10.5.3 不同组分不混溶流体包裹体组合的计算 .....   | 419        |
| 主要参考文献 .....   | 422        |
| <b>第 11 章 三类不混溶流体包裹体组合的测定、判别和计算 .....</b>                                  | <b>424</b> |
| 11.1 沸腾流体包裹体组合 .....   | 424        |
| 11.1.1 沸腾流体包裹体组合的特征 .....  | 424        |
| 11.1.2 盐水溶液-蒸气沸腾流体包裹体组合 .....  | 425        |
| 11.1.3 盐水溶液-蒸气沸腾流体包裹体组合的判别 .....   | 430        |
| 11.1.4 盐水溶液-蒸气沸腾流体包裹体组合计算实例 .....  | 432        |
| 11.2 挥发分-水溶液不混溶包裹体组合 .....   | 433        |
| 11.2.1 挥发分-水溶液不混溶包裹体组合的特征、室温下相态类型 .....                                    | 433        |
| 11.2.2 挥发分-水溶液不混溶包裹体组合分析方法和具体步骤 .....                                      | 435        |
| 11.2.3 CO <sub>2</sub> -纯/盐水不混溶包裹体组合特征 .....                               | 441        |
| 11.2.4 CO <sub>2</sub> -纯/盐水三种组合类型包裹体的测定方法和步骤 .....                        | 443        |
| 11.2.5 CO <sub>2</sub> -纯/盐水三种组合类型包裹体的计算实例 .....                           | 449        |
| 11.2.6 烃类-纯/盐水不混溶包裹体组合 .....   | 453        |
| 11.2.7 烃类-纯/盐水不混溶包裹体组合计算实例 .....   | 456        |
| 11.3 挥发分-熔体不混溶包裹体组合 .....  | 460        |
| 11.3.1 挥发分-熔体不混溶包裹体组合特征 .....  | 460        |
| 11.3.2 挥发分-熔体不混溶包裹体组合计算步骤 .....  | 462        |
| 11.3.3 CO <sub>2</sub> -熔体不混溶包裹体组合的测定和计算 .....                             | 463        |
| 11.3.4 H <sub>2</sub> O/盐水-熔体不混溶流体包裹体组合的测定和计算 .....                        | 464        |
| 11.3.5 (CO <sub>2</sub> -H <sub>2</sub> O-NaCl)-熔体体系不混溶流体包裹体组合的测定和计算 ..... | 466        |
| 主要参考文献 .....   | 467        |
| <b>第 12 章 烃类(油气)包裹体热力学参数的计算 .....</b>                                      | <b>470</b> |
| 12.1 石油包裹体热力学模拟方法的计算 .....   | 470        |
| 12.1.1 石油组成模式 .....  | 470        |
| 12.1.2 石油包裹体热力学模式 .....  | 471        |
| 12.1.3 计算方法 .....  | 476        |
| 12.1.4 测定步骤和计算程序 .....   | 479        |
| 12.1.5 计算实例 .....  | 480        |
| 12.2 复杂烃类(石油)包裹体热力学参数的相态平衡常数计算法 .....                                      | 482        |
| 12.2.1 “相态方程”在烃类包裹体“均一化”测定中的应用 .....                                       | 482        |

|   |     |
|---|-----|
| 12.2.2 包裹体均一化参数的简化计算——相平衡常数图表法                | 490 |
| 12.2.3 包裹体均一化参数的复杂计算——相态平衡常数公式计算法             | 497 |
| 12.2.4 烃类包裹体均一化参数的复杂计算——状态方程的逸度系数法            | 503 |
| 12.2.5 烃类包裹体均一化参数的严格计算——混合模型的活度系数法            | 509 |
| 12.2.6 复杂烃类(石油)包裹体均一和捕获时热力学参数计算软件             | 517 |
| 12.3 烃-烃不混溶包裹体组合的测定、判别和计算                     | 519 |
| 12.3.1 烃-烃不混溶体系包裹体组合                          | 519 |
| 12.3.2 A类相组合烃-烃不混溶体系包裹体组合的测定、判别和计算            | 521 |
| 12.3.3 B类相组合烃-烃不混溶体系包裹体组合的测定、判别和计算            | 528 |
| 12.3.4 C类相组合烃-烃不混溶体系包裹体组合的测定、判别和计算            | 533 |
| 主要参考文献  | 537 |
| <b>第 13 章 流体包裹体在区域热动力学计算中的应用</b>              | 540 |
| 13.1 利用单一盐水包裹体计算捕获时地层的古温度和古压力                 | 540 |
| 13.1.1 计算原理                                   | 540 |
| 13.1.2 计算方法                                   | 543 |
| 13.1.3 计算程序框图                                 | 548 |
| 13.1.4 计算实例                                   | 549 |
| 13.2 利用流体包裹体等容式和地层温度(压力)梯度式计算包裹体捕获温度和压力       | 552 |
| 13.2.1 计算原理                                   | 552 |
| 13.2.2 计算方法                                   | 553 |
| 13.2.3 常见几种流体包裹体计算图表                          | 553 |
| 13.2.4 计算实例                                   | 557 |
| 13.3 古地层剥蚀厚度的计算                               | 558 |
| 13.3.1 测定和计算原理                                | 558 |
| 13.3.2 应用实例                                   | 560 |
| 13.4 包裹体流体势的计算                                | 563 |
| 13.4.1 流体运移理论和流体势的概念                          | 563 |
| 13.4.2 流体势的两种表达式                              | 564 |
| 13.4.3 包裹体流体势的计算和等值线势图的绘制                     | 565 |
| 13.4.4 应用实例                                   | 568 |
| 主要参考文献  | 572 |
| <b>第 14 章 流体包裹体迹面表征参数的测定、断层应力参数分析和构造应力场模拟</b> | 574 |
| 14.1 FIP 表征参数特征                               | 574 |
| 14.1.1 FIP 类型和特征                              | 575 |

|                         |     |
|-------------------------|-----|
| 14.1.2 FIP 的构造应力和方位     | 575 |
| 14.1.3 FIP 表征参数类型       | 578 |
| 14.1.4 FIP 构造统计图的绘制     | 582 |
| 14.2 FIP 在断层应力参数分析中的应用  | 585 |
| 14.2.1 构造应力的概念和发展阶段     | 585 |
| 14.2.2 FIP 断层性质判别中的应用   | 586 |
| 14.2.3 应用实例             | 595 |
| 14.3 FIP 构造应力场数值模拟      | 603 |
| 14.3.1 构造应力场的概念及构成      | 603 |
| 14.3.2 FIP 古构造断层应力场测试   | 607 |
| 14.3.3 FIP 应力场模拟有关的计算公式 | 613 |
| 14.3.4 FIP 应力场模拟流程      | 617 |
| 14.3.5 应用实例             | 620 |
| 主要参考文献                  | 627 |

## 分 析 篇

|                                |     |
|--------------------------------|-----|
| 第 15 章 有限元分析在流体包裹体中的应用         | 635 |
| 15.1 有限单元法的基本概念和方法             | 638 |
| 15.1.1 有限单元法的基本步骤              | 638 |
| 15.1.2 位移场的有限单元分析概念和理论         | 652 |
| 15.1.3 有限元网格划分                 | 657 |
| 15.2 有限元分析在岩体 FIP 研究中的应用       | 658 |
| 15.3 有限元数值模拟 FIP 构造应力场         | 661 |
| 15.3.1 构造地质体 FIP 有限元数值模拟几个重要问题 | 662 |
| 15.3.2 FIP 数值模拟能提供的参数          | 665 |
| 15.3.3 有限元数值模拟的优缺点             | 665 |
| 15.3.4 有限元数值模拟需要进一步探讨的问题       | 666 |
| 15.4 有限元分析 ANSYS 软件            | 667 |
| 15.4.1 概述                      | 667 |
| 15.4.2 ANSYS 14.0 用户界面         | 667 |
| 15.4.3 ANSYS 文件系统              | 669 |
| 15.4.4 ANSYS 分析过程              | 671 |
| 15.5 应用实例——FIP 在白鹤岭岩体滑坡分析中的应用  | 673 |
| 主要参考文献                         | 679 |
| 第 16 章 分形理论和 FIP 分维测定          | 681 |
| 16.1 分形理论和分维测定方法               | 681 |

|                                    |            |
|------------------------------------|------------|
| 16.1.1 分形几何的基本概念                   | 682        |
| 16.1.2 分形与分维                       | 683        |
| 16.1.3 分形维数的定义                     | 684        |
| 16.1.4 分维测定方法                      | 687        |
| 16.2 岩体 FIP 分形结构                   | 689        |
| 16.2.1 岩体 FIP 分形特征                 | 689        |
| 16.2.2 最简单 FIP 分形结构模型              | 690        |
| 16.3 岩体 FIP 分维测定                   | 692        |
| 16.3.1 FIP 线裂分维                    | 692        |
| 16.3.2 FIP 面裂分维                    | 692        |
| 16.3.3 FIP 结构分维的测定                 | 693        |
| 16.4 几种典型岩体 FIP 分形结构模型             | 694        |
| 16.4.1 岩体 FIP 粗糙度系数的分形模型           | 694        |
| 16.4.2 岩体 FIP 迹长的分形模型              | 695        |
| 16.4.3 岩体 FIP 隙宽的分形模型              | 695        |
| 16.4.4 岩体 FIP 倾向的分形模型              | 696        |
| 16.4.5 岩体 FIP 间距的分形模型              | 696        |
| 16.4.6 岩体 FIP 贯通性的分形模型             | 697        |
| 16.4.7 岩体 FIP 网络的分形模型              | 697        |
| 16.4.8 岩体 FIP 网络的多重分形模型            | 698        |
| 16.4.9 岩体 FIP 分维测定意义和注意问题          | 699        |
| 16.5 应用实例——三峡库区断裂岩中 FIP 分形计算和分析    | 702        |
| 16.5.1 方法概述                        | 702        |
| 16.5.2 分析步骤                        | 704        |
| 16.5.3 三峡库区断裂岩中 FIP 分形测算           | 704        |
| 16.5.4 三峡库区断层中 FIP 形变的分形测算与地震危险性判定 | 715        |
| 16.5.5 水库诱发地震的预测                   | 717        |
| 主要参考文献                             | 718        |
| <b>第 17 章 小波分析在流体包裹体中的应用</b>       | <b>719</b> |
| 17.1 小波变换的有关概念及定义                  | 719        |
| 17.1.1 小波及小波基                      | 719        |
| 17.1.2 小波变换                        | 722        |
| 17.1.3 小波变换的性质                     | 725        |
| 17.2 小波分析在滤波和消噪中的应用                | 729        |
| 17.2.1 小波分析在滤波中的应用                 | 729        |
| 17.2.2 小波消噪方法                      | 729        |