

张弘, 高鹏鑫, 高卿楠. 热红外反射光谱技术在石英含量评价中的应用[J]. 岩矿测试, 2021, 40(5): 710 - 719.

ZHANG Hong, GAO Peng - xin, GAO Qing - nan. Application of Thermal Infrared Reflectance Spectroscopy in the Evaluation of Quartz Content[J]. Rock and Mineral Analysis, 2021, 40(5): 710 - 719. [DOI: 10.15898/j.cnki.11-2131/td.202104190053]

热红外反射光谱技术在石英含量评价中的应用

张弘, 高鹏鑫*, 高卿楠

(自然资源实物地质资料中心, 河北 三河 065201)

摘要: 石英是热液矿床重要的找矿标志,也是影响页岩气储层可压裂性评价的关键性因素,目前主要利用X射线衍射方法和扫描电镜矿物定量分析方法进行实验室内石英定量分析。为满足野外钻井现场进行快速、大批量矿物定量分析的需求,本文以羌塘盆地泥岩、砂岩、砾岩、灰岩和白云岩等沉积岩样品为研究对象,应用热红外反射光谱技术和综合自动矿物岩石学(QEMSCAN)矿物定量分析技术,开展了石英热红外反射光谱含量评价研究。结果表明:石英在8625nm、12640nm和14450nm三个特征中心波长位置的相对深度(D_{8625} 、 D_{12640} 、 D_{14450})可以用来区分陆源碎屑岩和碳酸盐岩,当 $D_{8625} > 0.14$ 或 $D_{12640} > 0.02$ 或 $D_{14450} > 0.02$ 时,样品岩性主要为陆源碎屑岩,否则主要为碳酸盐岩。此外, D_{8625} 、 D_{12640} 、 D_{14450} 三个石英光谱特征参数均与石英含量具有高度的相关性,均可以利用最小二乘法构建石英含量评价模型。以拟合优度(R^2)和均方根误差(RMSE)两个指标评价三个模型的精度,其中根据 D_{8625} 参数建立的石英含量估算模型的拟合优度最大($R^2 = 0.9237$),且均方根误差最小(RMSE = 8.51),基于此认为 D_{8625} 石英光谱参数可以作为评价石英含量的最优光谱指标。本文基于热红外反射光谱技术建立的该种野外快速估算钻井中石英含量的方法,为热液矿床找矿勘查和页岩气勘探开发提供了借鉴和参考。

关键词: 热红外反射光谱; 石英含量评价; 石英光谱特征参数; 线性回归分析

要点:

- (1) 利用热红外反射光谱技术和QEMSCAN矿物定量分析技术建立石英含量评价模型。
- (2) 利用石英的光谱特征参数(D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450})可以用来区分陆源碎屑岩和碳酸盐岩。
- (3) 根据 D_{8625} 参数建立的石英含量估算模型的线性拟合效果好,精度高,可以作为评价石英含量的最优光谱指标。

中图分类号: P575.4

文献标识码: B

石英是热液矿床主要的贯通性矿物之一,蕴含着丰富的成矿信息,热液在运移成矿过程中,形成的硅化作用是热液矿床重要的找矿标志^[1-7]。此外,石英在页岩气勘探开发过程中发挥着重要的作用,石英含量与总有机碳含量存在一定的相关关系,并且石英作为页岩中重要的脆性矿物,其含量成为影响页岩气储层可压裂性的关键性因素^[8-11]。因此,开展石英的定量研究在固体矿产和油气资源领域都具有十分重要的意义。目前主要的矿物定量分析方

法包括X射线衍射方法和扫描电镜矿物定量分析方法^[12-14],但是这两种方法均存在样品制备流程相对繁琐、测试成本较高、实验周期较长等缺点,从测试经费和实验周期等因素考虑,通常只挑选少量代表性样品进行分析,无法满足野外钻井现场对全孔岩心进行快速、大批量矿物定量分析的需求,在一定程度上制约了勘查效率。因此,急需开发一种新的技术方法来满足野外快速估算钻井中石英含量的需求。

收稿日期: 2021-04-19; 修回日期: 2021-06-28; 接受日期: 2021-07-28

基金项目: 中国地质调查局地质调查项目“油气地质调查钻井岩心保存参数采集与应用”(DD20201113)

第一作者: 张弘, 硕士, 工程师, 主要从事岩石光谱解译与应用研究。E-mail: 450865181@qq.com。

通信作者: 高鹏鑫, 高级工程师, 主要从事实物地质资料管理研究。E-mail: 565611549@qq.com。

热红外光谱技术是近十几年来新兴的一种快速、无损、精确识别矿物的技术手段,能够探测 Si_nO_k 、 CO_3 、 SO_4 、 PO_4 等原子基团基频振动,对无水无羟基矿物(架状硅酸盐、岛状硅酸盐、单链状硅酸盐、碳酸盐、硫酸盐)具有很好的识别效果,弥补了短波红外光谱只能识别含水含羟基矿物的缺陷^[15-17]。国内外学者主要利用热红外反射光谱识别与成矿作用密切相关的石英、长石、石榴子石、橄榄石、辉石、磷灰石、碳酸盐等矿物,并且根据矿物组合的分布特征、各种矿物相对含量的变化规律、指示性矿物特征吸收峰波长位置变化趋势等信息,结合地球化学获得的主微量元素、金属含量等信息,建立了矿床热红外光谱勘查模型,广泛应用于矽卡岩型、铁氧化物型、海底热水喷流沉积型、造山型金矿等各种类型矿床的矿物填图与找矿勘查工作^[18-23]。如 Lampinen 等^[21]通过对澳大利亚爱博铜铅多金属矿开展岩心热红外光谱扫描工作,认识到从近矿到远矿存在一套富镁菱铁矿、铁白云石、含二价铁的白云石逐步替代地层中的白云石基质,证实了存在一套可渗透的流体通道;Tappert 等^[22]通过对奥林匹克坝铁氧化物型铜金矿开展岩心热红外光谱扫描工作,发现从强蚀变带到弱蚀变带,多硅白云母在9600nm处反射峰的波长位置逐步向短波方向偏移,可以用来指示绢英岩化的蚀变程度。在矿物含量评价研究方面,国内外很多学者基于泰拉(Terra)卫星搭载的先进星载热辐射和反射辐射仪(ASTER)获取的热红外遥感数据、标准光谱库或者岩石样本的热红外发射光谱,开展了 SiO_2 以及石英含量的含量评价研究^[1,24-28],取得大量的研究成果。Hunt 和 Salibury 首先发现了岩浆岩的发射率光谱与 SiO_2 含量存在很强的相关性;Ninomiya 等基于 ASTER 卫星热红外数据建立了定性表征 SiO_2 含量的光谱指数;闫柏琨等和杨长保等通过研究标准光谱库或岩石库中矿物成分、含量和发射率光谱之间的相关性,建立了 SiO_2 含量评价模型;杜锦锦等^[26]、郭帮杰等^[27]通过研究不同含石英的岩石样品中发射率光谱特征和石英含量的相关性,建立了石英含量热红外高光谱遥感回归模型,并进行了野外验证。这些成果都是利用热红外发射光谱开展 SiO_2 以及石英含量评价方面的研究,而有关利用热红外反射光谱提取石英含量信息的研究鲜有报道。与热红外反射光谱相比,热红外发射光谱测试对样品以及环境的温度要求较高,数据处理过程也更加复杂,适合于星载、机载热红外传感器对星体、地表等目标进行大尺度远

端遥感探测。而在野外现场对钻井岩心等目标进行小尺度地面近端遥感探测,红外反射光谱更加适合于进行批量的矿物学信息提取。

本文选择羌塘盆地泥岩、砂岩、砾岩、灰岩和白云岩等典型沉积岩样品为研究对象,使用热红外反射光谱技术获取样品在热红外波段的反射率数据,结合 QEMSCAN 矿物定量分析技术获取样品中的石英含量,开展了石英热红外波段特征光谱参数和石英含量的相关性研究,使用最小二乘法建立了石英含量和光谱特征参数之间的线性回归模型,并采用拟合优度和均方根误差对模型的精度进行评价和检验。本研究旨在建立一种快速评估钻井岩心中石英含量的方法,为热液型金属矿产勘查与油气资源开发提供技术支撑。

1 实验部分

1.1 样品采集与制备

本次测试样品来源于羌塘盆地。羌塘盆地位于青藏高原北部,是中国陆上面积最大的中生代海相含油气盆地,油气资源潜力巨大。大地构造位置上,羌塘盆地位于特提斯—喜马拉雅构造域东段,油气地质条件与毗邻的西段中东油气区相似,使得羌塘盆地油气地质调查倍受关注^[29]。选择羌塘盆地北部玛曲地区 QZ16 和万安湖地区 QD17 两口钻井作为研究对象,从 QZ16 钻井中挑选出 25 块岩心样品,其中砂岩 11 块,砾岩 5 块,泥岩 2 块,灰岩 4 块,白云岩 3 块,样品编号由“QZ16”加阿拉伯数字组成;从 QZ17 钻井中挑选出 35 块岩心样品,其中砂岩 7 块,砾岩 1 块,灰岩 27 块,样品编号由“QZ17”加阿拉伯数字组成。

使用钻机钻取直径约 25mm 的柱塞样,沿着柱塞样其中一个端面进行切割,得到厚度约为 5mm 的薄片样和剩余柱塞样,与薄片样相连的剩余柱塞样端面用于测试热红外光谱数据,薄片样经过洗油、洗盐、烘干、抽真空注胶、机械抛光、氩离子抛光和喷碳处理后用于矿物成分定量分析。

1.2 热红外光谱测试

本次实验中,热红外光谱数据测试使用的仪器为 Agilent 4300 手持式热红外光谱仪,其优点在于分辨率高、探测波段宽、测试速度快。该仪器既可用于野外现场也可以用于室内环境,由于岩心放置于室内,因此本次热红外光谱数据测量均在室内进行。每次仪器开机后,必须使用金板对仪器进行定标,确保数据质量,在采集样品测量数据过程中确保仪器

探头与样品待测表面接触良好。

该仪器使用镜面反射探头附件采集样品热红外光谱数据,测试结果为样品反射率值,测试的波段范围为中红外—热红外波段,光谱范围为 $650 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ ($2500 \sim 15000 \text{ nm}$),分辨率为 4 cm^{-1} 。每个数据采集点进行了3次测量,取其平均值作为该数据采集点的热红外测试数据。为保证实验测试数据精度,每测试1h,需要对光谱仪进行定标^[30]。使用TSG8.0软件对样品的光谱进行数据处理和光谱吸收特征提取,首先需要将所有样品的光谱数据重采样至热红外波段,重采样后的波段范围为 $5500 \sim 15000 \text{ nm}$,分辨率为 25 nm 。然后将所有样品的光谱数据进行归一化处理,最后选择特征吸收峰的波长区间,采用减法运算对特征吸收峰波长区间的包络线进行局部连续去除,使用多项式拟合,提取去除包络线后的光谱数据在特征吸收峰波长区间内的吸收深度^[31]。

1.3 矿物成分定量分析

本次实验矿物成分定量分析使用的仪器为QEMSCAN 650F型矿物成分定量分析仪。该仪器是采用综合自动矿物岩石学检测方法(QEMSCAN),以扫描电镜+能谱仪为平台,结合数学科学和计算机科学发展而来的一种矿物综合分析技术^[32]。仪器在分析样品前需要对铜、金和石英三种标样进行校准,确保数据质量。

仪器工作条件为:电压 15 kV ,电流 5.5 nA ,工作距离 13 mm ,分辨率 $25 \mu\text{m}$ 。该仪器利用非常细的聚焦高能电子束在样品表面扫描激发出各种物理信息,通过背散射电子图像灰度与X射线的强度相结合能够得出元素的含量。使用iDiscover软件对数据进行处理,获取不同岩性薄片矿物定量分析结果。

2 结果与讨论

2.1 石英热红外反射光谱特征

石英在热红外波段的波峰形态呈典型的“M”状,主要由Si—O键的伸缩振动引起的。图1为样品QZ16-5的热红外光谱曲线,在本次采集样品中QZ16-5的石英含量最高,QEMSCAN分析结果显示石英含量为 79.02% 。从图1中可以看出,石英在热红外波段主要存在三个明显的波峰和波谷特征,波长中心位置分别位于 8625 nm 、 12640 nm 和 14450 nm 附近。在 8625 nm 附近存在一个十分尖锐的吸收谷,是石英最主要的光谱特征,归属于Si—O键的不对称伸缩振动;在 12640 nm 附近存在次级的

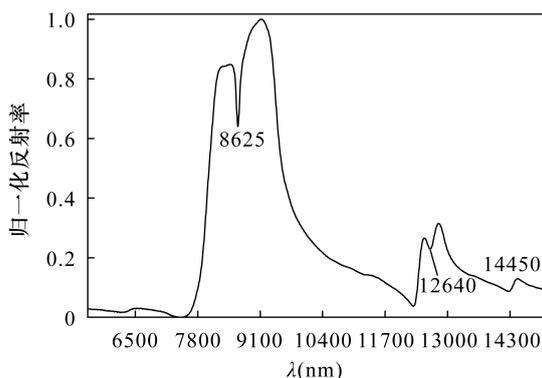


图1 石英热红外光谱特征

Fig. 1 Characteristics of thermal infrared spectrum of quartz

吸收谷,在 14450 nm 附近存在较弱的反射峰,两处光谱特征都归属于Si—O键的对称伸缩振动^[33]。

2.2 不同岩性样品石英热红外波段光谱特征

使用TSG8.0软件提取泥岩、砂岩、砾岩、灰岩和白云岩等5种主要岩性沉积岩样品在石英三个特征中心波长位置(8625 nm 、 12640 nm 和 14450 nm)的相对深度,分别以 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 表示。不同岩性样品石英的光谱特征参数和石英含量见表1。

由表1中数据可见,泥岩样品中石英含量为 $41.77\% \sim 78.73\%$; D_{8625} 值为 $0.176 \sim 0.237$,平均值为 0.2065 ; D_{12640} 值为 $0.0301 \sim 0.0627$,平均值为 0.0464 ; D_{14450} 值为 $0.0292 \sim 0.032$,平均值为 0.03 。砂岩样品中石英含量为 $34.75\% \sim 79.02\%$; D_{8625} 值为 $0.142 \sim 0.245$,平均值为 0.195 ; D_{12640} 值为 $0.0283 \sim 0.0609$,平均值为 0.049 ; D_{14450} 值为 $0.0194 \sim 0.0488$,平均值为 0.031 。砾岩样品中石英含量为 $57.63\% \sim 71.46\%$; D_{8625} 值为 $0.174 \sim 0.218$,平均值为 0.2 ; D_{12640} 值为 $0.0323 \sim 0.0484$,平均值为 0.04 ; D_{14450} 值为 $0.0107 \sim 0.032$,平均值为 0.025 。灰岩样品中石英含量为 $0.6\% \sim 26.14\%$; D_{8625} 值为 $0 \sim 0.0182$,平均值为 0.017 ; D_{12640} 值为 $0 \sim 0.0465$,平均值为 0.005 ; D_{14450} 值为 $0 \sim 0.0355$,平均值为 0.003 。白云岩样品中石英含量为 $6.29\% \sim 39.33\%$; D_{8625} 值为 $0.00603 \sim 0.202$,平均值为 0.106 ; D_{12640} 值为 $0.000557 \sim 0.0458$,平均值为 0.022 ; D_{14450} 值为 $0 \sim 0.032$,平均值为 0.018 。

泥岩、砂岩、砾岩等陆源碎屑岩样品和灰岩、白云岩等碳酸盐岩样品在石英含量上存在明显的差异,通过 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 三个石英的特征光谱参数可以区分陆源碎屑岩和碳酸盐岩样品。图2为不同岩性样品在 8625 nm 、 12640 nm 和 14450 nm 处的吸收深度,总体而言,泥岩、砂岩、砾岩等陆源碎屑岩样

表1 样品中石英含量及光谱特征参数

Table 1 Quartz content and spectral characteristic parameters in samples

样品编号	岩性	石英含量 (%)	D_{8625}	D_{12640}	D_{14450}	样品编号	岩性	石英含量 (%)	D_{8625}	D_{12640}	D_{14450}
QZ16-7	泥岩	78.73	0.237	0.0627	0.0292	QD17-19	灰岩	9.23	0.0125	0.00738	0.00124
QZ16-17	泥岩	41.77	0.176	0.0301	0.032	QD17-36	灰岩	8.09	0.00581	0	0.00385
QZ16-5	砂岩	79.02	0.235	0.0588	0.0268	QD17-26	灰岩	7.29	0.00937	0	0.00158
QZ16-10	砂岩	75.63	0.245	0.0593	0.0307	QD17-8	灰岩	7.26	0.02	0.00571	0.00353
QZ16-9	砂岩	71.74	0.24	0.0583	0.0304	QD17-22	灰岩	6.42	0.0182	0.00748	0.0131
QD17-5	砂岩	66.82	0.209	0.0561	0.0295	QD17-15	灰岩	6.24	0.0077	0.00364	0.00462
QD17-1	砂岩	64.14	0.191	0.0609	0.0247	QD17-23	灰岩	5.97	0.0173	0.00175	0
QD17-2	砂岩	63.47	0.184	0.0605	0.0334	QZ16-20	灰岩	5.91	0.0151	0.0018	0.00199
QD17-3	砂岩	62.43	0.183	0.0524	0.0307	QD17-35	灰岩	5.69	0	0.00309	0.00768
QZ16-3	砂岩	62.30	0.227	0.061	0.0386	QD17-7	灰岩	5.67	0.00286	0.00319	0.00323
QZ16-1	砂岩	60.44	0.229	0.0534	0.0258	QD17-9	灰岩	5.28	0.0159	0.00291	0
QZ16-23	砂岩	58.86	0.226	0.0397	0.0488	QD17-16	灰岩	5.21	0	0.00336	0.00245
QD17-41	砂岩	52.97	0.187	0.0487	0.03	QD17-13	灰岩	5.19	0.00824	0.00329	0
QZ16-25	砂岩	43.44	0.155	0.035	0.0237	QD17-11	灰岩	4.72	0.00864	0.00211	0
QZ16-19	砂岩	36.94	0.161	0.0394	0.0429	QD17-10	灰岩	4.48	0.00247	0.00352	0
QZ16-8	砂岩	36.04	0.156	0.0497	0.0327	QD17-12	灰岩	4.29	0	0.00141	0
QD17-40	砂岩	35.21	0.195	0.0467	0.0317	QD17-21	灰岩	3.98	0.017	0.00258	0
QZ16-11	砂岩	34.90	0.148	0.0283	0.0251	QZ16-21	灰岩	3.79	0.00358	0.00286	0.000608
QZ16-16	砂岩	34.89	0.142	0.0352	0.0311	QD17-27	灰岩	3.79	0.00502	0.000941	0.000561
QD17-24	砂岩	34.75	0.174	0.0374	0.0194	QD17-25	灰岩	3.45	6.40E-05	0.00312	0.000744
QD17-38	砂岩	56.36	0.211	0.0527	0.0295	QD17-20	灰岩	2.46	0.00739	0.00196	0.000867
QZ16-29	砾岩	71.46	0.174	0.0413	0.0276	QD17-17	灰岩	2.05	0.0183	0.0038	0
QZ16-28	砾岩	71.24	0.214	0.0374	0.0273	QD17-29	灰岩	1.71	7.40E-05	0.000914	0.00274
QZ16-31	砾岩	62.77	0.199	0.0484	0.0107	QZ16-14	灰岩	1.59	0.00212	0.00149	0
QZ16-30	砾岩	58.09	0.218	0.0415	0.032	QD17-30	灰岩	1.03	0	0.000962	0.000291
QZ16-26	砾岩	57.63	0.196	0.0323	0.028	QD17-18	灰岩	0.93	0.00835	0.00271	0.00269
QD17-34	灰岩	26.14	0.16	0.0465	0.0355	QD17-31	灰岩	0.60	0.00821	0.0015	0
QD17-32	灰岩	14.28	0.0754	0.0133	0.00752	QZ16-27	白云岩	39.33	0.202	0.0458	0.032
QZ16-13	灰岩	12.43	0.0841	0.00925	0.00446	QZ16-22	白云岩	24.13	0.111	0.0199	0.022
QD17-14	灰岩	9.41	0.00144	0.00464	0.0027	QZ16-18	白云岩	6.29	0.00603	0.000557	0

品在 8625nm、12640nm 和 14450nm 处的吸收深度普遍大于灰岩、白云岩等碳酸盐岩样品。本次研究结果表明当 $D_{8625} > 0.14$ 或 $D_{12640} > 0.02$ 或 $D_{14450} > 0.02$ 时,样品岩性主要为泥岩、砂岩、砾岩等陆源碎屑岩;而当 $D_{8625} < 0.14$ 或 $D_{12640} < 0.02$ 或 $D_{14450} < 0.02$ 时,样品岩性主要为灰岩、白云岩等沉积岩。由此可以通过分析 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 三个石英光谱特征参数,建立一种快速区分陆源碎屑岩和沉积岩的热红外光谱方法。

2.3 石英含量和石英光谱特征参数相关性分析

使用 SPSS25 软件分别对石英含量和石英光谱特征参数 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 之间的皮尔森 (Pearson) 相关性和显著性检验参数进行分析。皮尔森相关系数介于 -1 与 +1 之间,其绝对值越接近于 1,表示两个变量之间的相关性越高;采用双侧显著性水平检验变量之间相关性是否显著,用 sig 值

表示,如果该值小于 0.01,表明两个变量之间具有极显著的相关性^[34-36]。结果显示, D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 与石英含量的皮尔森相关系数分别为 0.957、0.945 和 0.846,都处于高度相关;显著性检验参数 (sig 值)分别为 3.098×10^{-33} 、 3.996×10^{-30} 、 8.241×10^{-18} ,都具有极显著的相关性。表明 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 三个石英的光谱特征参数都可以与石英含量进行线性回归分析。

2.4 石英含量回归模型构建及精度评价

将 60 件测试样本分为两组:一组 40 件作为训练样本,采用最小二乘法分别建立石英含量和石英光谱特征参数 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 的一元线性回归模型,使用判定系数 (R^2) 测定回归模型的拟合程度。 R^2 越接近于 1,表示测试值和实验值的拟合程度越好;另一组 20 件作为测试样本,用于评价模型的精度,使用均方根误差 (RMSE) 来检验。RMSE 值

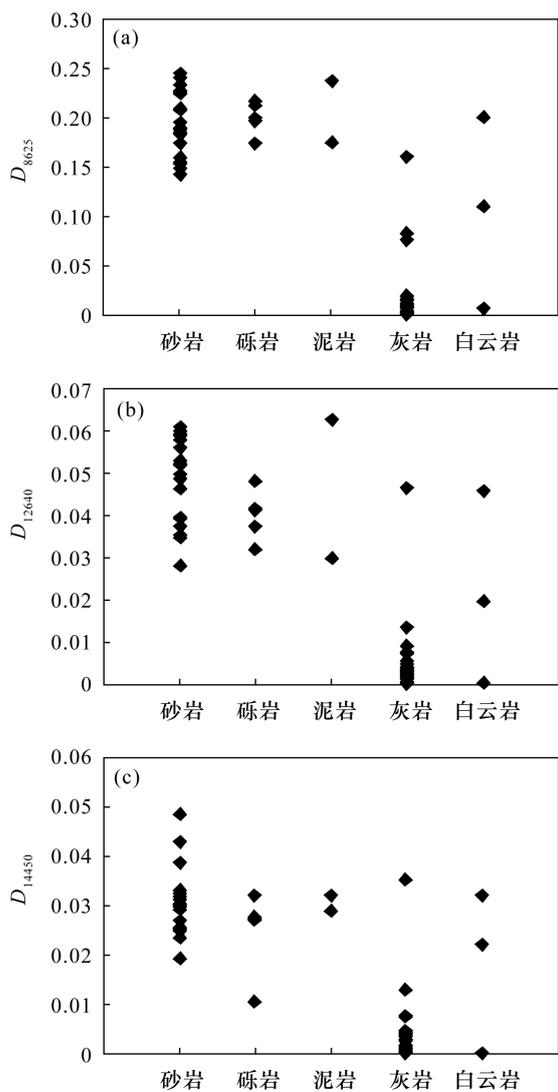


图2 不同岩性样品在 (a) 8625nm、(b) 12640nm 和 (c) 14450nm 处的吸收深度

Fig. 2 Absorption depths at (a) 8625nm, (b) 12640nm and (c) 14450nm of different lithology samples

越小,模型的精度越高,预测能力越好^[34]。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\mu_i - \hat{\mu}_i)^2}$$

式中: μ_i 为石英含量实验值; $\hat{\mu}_i$ 为模型估算的石英含量; n 为样品数量。

图3为训练样本中石英含量与石英光谱特征参数 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 的线性回归模型。其中, D_{8625} 与石英含量的回归方程为: $y = 282.04 \times D_{8625} + 1.2448$, $R^2 = 0.9237$; D_{12640} 与石英含量的回归方程为: $y = 1117.7 \times D_{12640} + 2.6421$, $R^2 = 0.8993$; D_{14450} 与石英含量的回归方程为: $y = 1463 \times D_{14450} + 6.4666$, $R^2 = 0.6504$ 。上述三个回归方程中 y 均表示为石英含量。从图3中可以看出,依据 D_{14450} 参数

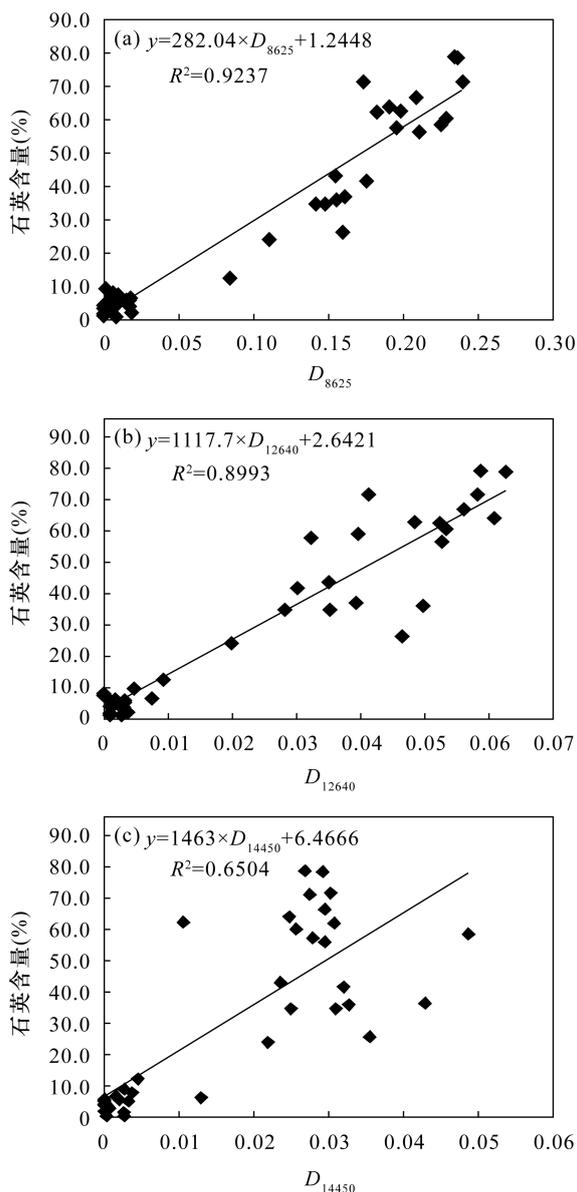


图3 训练样本中石英含量与 (a) D_{8625} 、(b) D_{12640} 和 (c) D_{14450} 线性拟合图

Fig. 3 Linear fitting diagrams of quartz content associated with (a) D_{8625} , (b) D_{12640} and (c) D_{14450} in training samples

建立的线性回归模型其数据离散程度最大, D_{12640} 次之, D_{8625} 最低。此外, D_{8625} 与石英含量的拟合效果最好, D_{12640} 次之, D_{14450} 与石英含量的拟合效果最差, 表明三个线性回归模型中, 使用 D_{8625} 参数建立的石英含量估算值与实际值差别最小。

将20件测试样本数据分别代入训练样本建立的三个石英定量反演模型中, 使用均方根误差 (RMSE) 来评价三个模型的精度。表2为三个模型的石英含量反演结果和模型均方根误差。可以看

出,根据 D_{8625} 石英光谱特征参数建立的石英含量模型的均方根误差最小(8.51), D_{12640} 模型次之(9.28), D_{14450} 模型的均方根误差最大(10.38),表明依据 D_{8625} 参数建立的石英定量反演模型的精度最高,预测能力最好。

表2 三个模型石英含量反演结果及模型均方根误差

Table 2 Inversion results of quartz content and root mean square error of three models

样品编号	石英含量 QEMSCAN 分析结果 (%)	三个模型预测的石英含量(%)		
		D8625 模型 (RMSE = 8.51)	D12640 模型 (RMSE = 9.28)	D14450 模型 (RMSE = 10.38)
QZ16-10	75.63	70.34	68.92	51.38
QZ16-28	71.24	61.60	44.44	46.41
QD17-2	63.47	53.14	70.26	55.33
QZ16-3	62.30	65.27	70.82	62.94
QZ16-30	58.09	62.73	49.03	53.28
QD17-41	52.97	53.99	57.07	50.36
QZ16-27	39.33	58.22	53.83	53.28
QD17-40	35.21	56.24	54.84	52.84
QD17-24	34.75	50.32	44.44	34.85
QD17-32	14.28	22.51	17.51	17.47
QD17-19	9.23	4.77	10.89	8.28
QD17-8	7.26	6.89	9.02	11.63
QD17-15	6.24	3.42	6.71	13.23
QD17-35	5.69	1.24	6.10	17.70
QD17-16	5.21	1.24	6.40	10.05
QD17-10	4.48	1.94	6.58	6.47
QZ16-21	3.79	2.25	5.84	7.36
QD17-20	2.46	3.33	4.83	7.74
QZ16-14	1.59	1.84	4.31	6.47
QD17-31	0.60	3.56	4.32	6.47

3 结论

本文以羌塘盆地砂岩、灰岩、泥岩、砾岩和白云岩等沉积岩样品为研究对象,应用热红外反射光谱技术和 QEMSCAN 矿物定量分析技术,开展了石英定量反演模型研究。 D_{8625} 、 D_{12640} 和 D_{14450} 三个光谱特征参数与石英含量都具有高度的相关性,都可以用来模拟石英含量,其中根据 D_{8625} 参数建立的石英含量估算模型的线性拟合程度最好,均方根误差最小,可以作为反演石英含量的最优光谱指标。

本文尝试应用热红外反射光谱建立了石英定量反演模型,可以为野外钻井现场提供一种快速、无损的石英含量评价方法,为热液矿床以及页岩气的勘查和开发提供重要的技术指导。本研究建立的石英热红外光谱反演模型具有很高的拟合优度,但数据点分布相对有些离散,下一步可以通过优化石英光谱特征参数提取方法来进一步提高石英含量的反演精度。

4 参考文献

- [1] 郭帮杰,张杰林,武鼎.热红外高光谱遥感回归分析定量反演石英含量[J].科学技术与工程,2018,18(17):125-130.
Guo B J, Zhang J L, Wu D. Thermal hyperspectral remote sensing for the quantitative inversion of quartz content by regression analysis [J]. Science Technology and Engineering, 2018, 18(17): 125-130.
- [2] 陈静,周涛发,张乐骏,等.蚀变岩帽的特征、成因以及在华南的分布探讨[J].岩石学报,2020,36(11):3380-3396.
Chen J, Zhou T F, Zhang L J, et al. A discussion of characteristics, genesis of lithocaps and their distributions in South China [J]. Acta Petrologica Sinica, 2020, 36(11): 3380-3396.
- [3] 崔霄峰,张宇,李肖龙.内蒙古喀喇沁旗安家营子金矿蚀变及其分布研究[J].地质与勘探,2021,57(1):1-13.
Cui X F, Zhang Y, Li X L. Alteration and distribution of Anjiayingzi gold deposit in Harqin Banner, Inner Mongolia [J]. Geology and Exploration, 2021, 57(1): 1-13.
- [4] 金露英,秦克章,李光明,等.斑岩钼-热液脉状铅锌银矿成矿系统特征、控制因素及勘查指示[J].岩石学报,2020,36(12):3813-3839.
Jin L Y, Qin K Z, Li G M, et al. Characteristics, controlling factors and exploration implications of porphyry molybdenum-hydrothermal vein-style lead-zinc-silver metallogenic systems [J]. Acta Petrologica Sinica, 2020, 36(12): 3813-3839.
- [5] 孙雨沁,于学峰,单伟,等.胶东焦家断裂带3000m深部矿化特征及金矿物赋存状态[J].地球学报,2020,41(6):919-937.
Sun Y Q, Yu X F, Dan W, et al. Mineralization characteristics and modes of occurrence of gold minerals at the depth of 3000 meters in Jiaojia fault zone, Jiaodong Peninsula [J]. Acta Geoscientia Sinica, 2020, 41(6): 919-937.
- [6] 于立栋,张海微,张静,等.东天山玉峰金矿热液蚀变作用与元素迁移规律[J].岩石学报,2020,36(5):1597-1610.
Yu L D, Zhang H W, Zhang J, et al. Hydrothermal alteration and element migration in the Yufeng gold deposit, Eastern Tianshan Orogen [J]. Acta Petrologica

- Simica, 2020, 36(5): 1597 - 1610.
- [7] 张海坤, 胡鹏, 姜军胜, 等. 印度尼西亚苏门答腊岛马塔比(Martabe)浅成低温热液型金-银矿床的地质特征与找矿标志[J]. 高校地质学报, 2021, 27(2): 163 - 171.
- Zhang H K, Hu P, Jiang J S, et al. Geological features and prospecting indicators of martabe epithermal Au - Ag deposit, Sumatra, Indonesia [J]. Geological Journal of China Universities, 2021, 27(2): 163 - 171.
- [8] 田兴旺, 胡国艺, 苏桂萍, 等. 川南威远川南威远地区W201井古生界海相页岩矿物特征[J]. 新疆石油地质, 2018, 39(4): 409 - 415.
- Tian X W, Hu G Y, Su G P, et al. Mineralogical characteristics of Paleozoic marine shales in Well W201 of Weiyuan area, Southern Sichuan Basin [J]. Xinjiang Petroleum Geology, 2018, 39(4): 409 - 415.
- [9] 卢龙飞, 秦建中, 申宝剑, 等. 川东南涪陵地区五峰—龙马溪组硅质页岩的生物成因及其油气地质意义[J]. 石油实验地质, 2016, 38(4): 460 - 465.
- Lu L F, Qin J Z, Shen B J, et al. Biogenic origin and hydrocarbon significance of siliceous shale from the Wufeng—Longmaxi formations in Fuling area, southeastern Sichuan Basin [J]. Petroleum Geology & Experiment, 2016, 38(4): 460 - 465.
- [10] 孙川翔, 聂海宽, 刘光祥, 等. 石英矿物类型及其对页岩气富集开采的控制: 以四川盆地及其周缘五峰组—龙马溪组为例[J]. 地球科学, 2019, 44(11): 3692 - 3704.
- Sun C X, Nie H K, Liu G X, et al. Quartz type and its control on shale gas enrichment and production: A case study of the Wufeng—Longmaxi Formations in the Sichuan Basin and its surrounding areas, China [J]. Earth Science, 2019, 44(11): 3692 - 3704.
- [11] 郭雯, 董大忠, 李明, 等. 富有机质页岩中石英的成因及对储层品质的指示意义——以四川盆地东南部及周缘龙马溪组龙-1亚段为例[J]. 天然气工业, 2021, 41(2): 65 - 74.
- Guo W, Dong D Z, Li M, et al. Quartz genesis in organic-rich shale and its indicative significance to reservoir quality: A case study on the first submember of the first member of Lower Silurian Longmaxi Formation in the southeastern Sichuan Basin and its periphery [J]. Natural Gas Industry, 2021, 41(2): 65 - 74.
- [12] 陈倩, 宋文磊, 杨金昆, 等. 矿物自动定量分析系统的基本原理及其在岩矿研究中的应用——以捷克泰恩肯公司TIMA为例[J]. 矿床地质, 2021, 40(2): 345 - 368.
- Chen Q, Song W L, Yang J K, et al. Principle of automated mineral quantitative analysis system and its application in petrology and mineralogy: An example from TESCANA TIMA [J]. Mineral Deposits, 2021, 40(2): 345 - 368.
- [13] 温利刚, 曾普胜, 詹秀春, 等. 矿物表征自动定量分析系统(AMICS)技术在稀土稀有矿物鉴定中的应用[J]. 岩矿测试, 2018, 37(2): 121 - 129.
- Wen L G, Zeng P S, Zhan X C, et al. Application of the automated mineral identification and characterization system (AMICS) in the identification of rare earth and rare minerals [J]. Rock and Mineral Analysis, 2018, 37(2): 121 - 129.
- [14] 伍月, 迟广成, 刘欣. X射线粉晶衍射法在变粒岩鉴定与分类中的应用[J]. 岩矿测试, 2020, 39(4): 546 - 554.
- Wu Y, Chi G C, Liu X. Application of X-ray powder diffraction method in identification and classification of leptite [J]. Rock and Mineral Analysis, 2020, 39(4): 546 - 554.
- [15] 闫柏琨, 王润生, 甘甫平, 等. 热红外遥感信息岩矿信息提取研究进展[J]. 地球科学进展, 2005, 20(10): 1116 - 1126.
- Yan B K, Wang R S, Gan F P. Progresses in minerals information extraction using thermal remote sensing [J]. Advances in Earth Science, 2005, 20(10): 1116 - 1126.
- [16] 代晶晶, 赵龙贤, 姜琪, 等. 热红外高光谱技术在地质找矿中的应用综述[J]. 地质学报, 2020, 94(8): 2520 - 2533.
- Dai J J, Zhao L X, Jiang Q, et al. Review of thermal-infrared spectroscopy applied in geological ore exploration [J]. Acta Geologica Sinica, 2020, 94(8): 2520 - 2533.
- [17] Van der Meer F D, Van der Werff H M F, Van der Ruitenbeek F J K, et al. Multi- and hyperspectral geologic remote sensing: A review [J]. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation, 2012, 14(1): 112 - 128.
- [18] Arne D, House E, Pontual S, et al. Hyperspectral interpretation of selected drill cores from orogenic gold deposits in central Victoria, Australia [J]. Australian

- Journal of Earth Sciences,2016,63(8):1003-1025.
- [19] Cudahy T. Mineral mapping for exploration; An Australian journey of evolving spectral sensing technologies and industry collaboration [J]. Geosciences, 2016, 6(4): 2076-3263.
- [20] Laukamp C, Rodger A, LeGras M, et al. Mineral physicochemistry underlying feature-based extraction of mineral abundance and composition from shortwave, mid and thermal infrared reflectance spectra [J]. Minerals, 2021, 11(4): 1-37.
- [21] Lampinen H M, Laukamp C, Occhipinti S A, et al. Mineral footprints of the Paleoproterozoic sediment-hosted Abra Pb-Zn-Cu-Au deposit Capricorn Orogen, western Australia [J]. Ore Geology Reviews, 2019, 104: 436-461.
- [22] Tappert M C, Rivard B, Giles D, et al. The mineral chemistry, near-infrared, and mid-infrared reflectance spectroscopy of phengite from the Olympic Dam IOCG deposit, South Australia [J]. Ore Geology Reviews, 2013, 53: 26-38.
- [23] 史维鑫, 易锦俊, 王浩, 等. 马坑铁矿钻孔岩心红外光谱特征及蚀变分带特征研究 [J]. 岩矿测试, 2020, 39(6): 934-943.
- Shi W X, Yi J J, Wang H, et al. Study on the characteristics of the infrared spectrum and the alteration zoning of drill core in the Makeng iron deposit [J]. Rock and Mineral Analysis, 2020, 39(6): 934-943.
- [24] Bastero C F, Lagmay A M F A. Estimating SiO₂ content of lava deposits in the humid tropics using remotely sensed imagery [J]. Journal of Volcanology and Geothermal Research, 2006, 151(4): 357-364.
- [25] Guo B J, Zhang J L. Airborne hyperspectral remote sensing technology for polymetallic ore and uranium deposits exploration in East Junggar [J]. Acta Geologica Sinica (English Edition), 2014, 88(Supplement 2): 1347-1348.
- [26] 杜锦锦, 王俊虎, 郎朋林. 基于 102F 实测热红外光谱的富硅类岩石 SiO₂ 含量定量反演 [J]. 世界核地质科学, 2016, 33(4): 216-222.
- Du J J, Wang J H, Lang P L. Quantitative inversion of SiO₂ contents in silicon rich rocks based on measured 102F thermal infrared spectra [J]. World Nuclear Geoscience, 2016, 33(4): 216-222.
- [27] 郭帮杰, 张杰林, 武鼎, 等. 高光谱遥感在硅化带识别中的应用 [J]. 科学技术与工程, 2017, 17(3): 154-158.
- Guo B J, Zhang J L, Wu D, et al. Application of hyperspectral remote sensing in silicified zone identification [J]. Science Technology and Engineering, 2007, 11(4): 601-608.
- [28] 刘道飞, 陈圣波, 陈磊, 等. 以 SiO₂ 含量为辅助因子的 ASTER 热红外遥感硅化信息提取 [J]. 地球科学——中国地质大学学报, 2015, 40(8): 1396-1402.
- Liu D F, Chen S B, Chen L, et al. Silicification information extraction based on the content of SiO₂ from ASTER TIR data [J]. Earth Science (Journal of China University of Geosciences), 2015, 40(8): 1396-1402.
- [29] 王剑, 付修根, 沈利军, 等. 论羌塘盆地油气勘探前景 [J]. 地质论评, 2020, 66(5): 1091-1113.
- Wang J, Fu X G, Shen L J, et al. Prospect of the potential of oil and gas resources in Qiangtang Basin, Xizang (Tibet) [J]. Geological Review, 2020, 66(5): 1091-1113.
- [30] 回广骥, 高卿楠, 宋利强, 等. 新疆可可托海稀有金属矿床矿物和岩石热红外光谱特征 [J]. 岩矿测试, 2021, 40(1): 134-144.
- Hui G J, Gao Q N, Song L Q, et al. Thermal infrared spectra characteristics of rare metal minerals and rock in the Keketuohai deposit, Xinjiang [J]. Rock and Mineral Analysis, 2021, 40(1): 134-144.
- [31] 张弘, 高卿楠, 郭东旭, 等. 花岗伟晶岩型锂矿热红外反射光谱特征及锂元素定量反演研究 [J]. 矿物岩石, 2021, 41(1): 25-31.
- Zhang H, Gao Q N, Guo D X, et al. Characteristics of thermal infrared reflectance spectra and quantitative inversion of lithium element in granite pegmatite type lithium deposit [J]. Mineralogy and Petrology, 2011, 41(1): 25-31.
- [32] 李俊键, 成宝洋, 刘仁静, 等. 基于数字岩心的孔隙尺度砂砾岩水敏微观机理 [J]. 石油学报, 2019, 40(5): 594-603.
- Li J J, Cheng B Y, Liu R J, et al. Microscopic mechanism of water sensitivity of pore-scale sandy conglomerate based on digital core [J]. Acta Petrolei Sinica, 2019, 40(5): 594-603.
- [33] 吕文超, 杨志军, 周永章, 等. 钦杭结合带南段和寮铅锌多金属矿床石英的谱学特征及其指示意义 [J]. 光谱学与光谱分析, 2013, 33(5): 1374-1378.

Lv W C, Yang Z J, Zhou Y Z, et al. Spectral characteristics and implications of quartz from Heliao lead - zinc polymetallic ore district in the south of Qinzhou—Hangzhou joint belt [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2013, 33 (5) : 1374 - 1378.

[34] 尤金凤, 邢立新, 潘军, 等. 油砂光谱特性及其含油率遥感估算研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2015, 35 (4) : 1025 - 1029.

You J F, Xing L X, Pan J, et al. Research on oil sands spectral characteristics and oil content by remote sensing estimation [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2015, 35 (4) : 1025 - 1029.

[35] 樊瑞雪, 邢立新, 潘军, 等. 油砂的光谱特性及其遥感

应用 [J]. 吉林大学学报 (地球科学版), 2019, 49 (2) : 603 - 610.

Fan R X, Xing L X, Pan J, et al. Oil sands spectral reflection characteristics and remote sensing application [J]. Journal of Jilin University (Earth Science Edition), 2019, 49 (2) : 603 - 610.

[36] 成功, 李嘉璇, 王朝鹏, 等. 离子型稀土矿含量高光谱定量反演研究 [J]. 光谱学与光谱分析, 2019, 39 (5) : 1571 - 1578.

Cheng G, Li J X, Wang C P, et al. Study on hyperspectral quantitative inversion of ionic rare earth ore [J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2019, 39 (5) : 1571 - 1578.

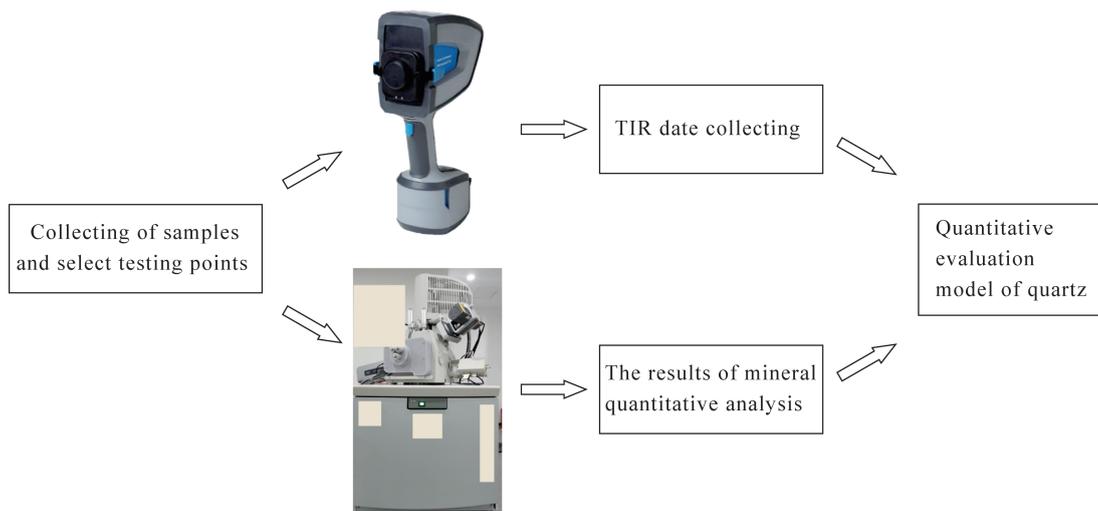
Application of Thermal Infrared Reflectance Spectroscopy in the Evaluation of Quartz Content

ZHANG Hong, GAO Peng - xin^{*}, GAO Qing - nan

(Core and Samples Centre of Land and Resources, Sanhe 065201, China)

HIGHLIGHTS

- (1) A quantitative evaluation model of quartz content was established by using thermal infrared reflectance spectroscopy and QEMSCAN mineral quantitative analysis technology.
- (2) The spectral characteristic parameters of quartz (D_{8625} , D_{12640} and D_{14450}) can be used to distinguish terrigenous clastic rocks from carbonate rocks.
- (3) The quartz content estimation model based on the D_{8625} parameter has the best linear fitting effect and the highest accuracy. It can also be used as the optimal spectral index for quartz content evaluation.



ABSTRACT

BACKGROUND: Quartz is not only an important prospecting indicator of hydrothermal deposits, but also a key factor affecting the evaluation of shale gas reservoir fracturing. It is of great significance to carry out the rapid evaluation of quartz content in field drilling. However, the analysis process of conventional methods (X-ray diffraction method and scanning electron microscope) is relatively long.

OBJECTIVES: To establish a rapid and large-scale quantitative evaluation model of quartz based on thermal infrared reflectance.

METHODS: Handheld FTIR spectrometer and mineral quantitative analyzer were used to analysis the content and characteristic absorption peak intensity of quartz, from mudstone, sandstone, conglomerate, limestone and dolomite samples in the Qiangtang Basin.

RESULTS: The relative depth (D_{8625} , D_{12640} , D_{14450}) of quartz at the three characteristic center wavelength positions of 8625nm, 12640nm and 14450nm can be used to distinguish terrigenous clastic rocks from carbonate rocks. When $D_{8625} > 0.14$ or $D_{12640} > 0.02$ or $D_{14450} > 0.02$, the samples are mainly terrigenous clastic rocks. In addition, three quartz spectral characteristic parameters D_{8625} , D_{12640} , and D_{14450} all have a high correlation with the quartz content, and the least square method can be used to construct a quartz content evaluation model. Two indicators of goodness of fit (R^2) and root mean square error (RMSE) were used to evaluate the accuracy of the three models. Among them, the quartz content estimation model based on D_{8625} parameters had the highest goodness of fit ($R^2 = 0.9237$), with the smallest root square error (RMSE = 8.51). Based on this, it is believed that the D_{8625} quartz spectral parameters can be used as the optimal spectral index for evaluating the quartz content.

CONCLUSIONS: Based on thermal infrared reflectance spectroscopy technology, a field method for quickly estimating the content of quartz in drilling core has been established, which provides reference for prospecting and exploration of hydrothermal deposits and shale gas exploration and development.

KEY WORDS: thermal infrared reflectance spectroscopy; quantitative evaluation of quartz; spectral characteristic parameters of quartz; linear regression analysis