Nouveaux outils pour la construction de modèles de bassins

De nombreuses difficultés sont rencontrées dans la mise en œuvre des méthodes et des outils de simulation des bassins sédimentaires. Tout d'abord, du fait du caractère intrinsèquement multidisciplinaire de la modélisation de bassin, ceux qui la pratiquent ont souvent quelques connaissances en mathématiques appliquées, en géologie, en mécanique, en chimie, en biologie, en géophysique ou encore en thermodynamique. Toutefois ils ne sont guère spécialistes que d'une d'entre elles tout au plus. Par ailleurs, les échelles de temps et d'espace de simulation sont particulièrement grandes en comparaison de la taille des objets mesurés (échantillons de roche, puits...) et des durées d'études expérimentales. Ces écarts imposent des changements d'échelles importants dans la description des phénomènes, dans leur application et dans l'interprétation des résultats. Enfin, le temps disponible pour la réalisation des études des bassins sédimentaires est souvent compté. Ce contexte oblige donc à adopter des approches pragmatiques qui peuvent alors vite être critiquées par des spécialistes d'une discipline spécifique.

Waples (1992a, b) et Burrus (1997) donnent un très bon aperçu des méthodes mises en œuvre par les modélisateurs de bassins pour l'analyse thermique des systèmes pétroliers. Ils décrivent précisément des approches pragmatiques fréquemment mises en œuvre par les géologues afin de prendre en compte les données et afin de les interpréter en lien avec les phénomènes thermiques. Ils illustrent de quelle manière sont construits et testés les différents scénarios géologiques dans les modélisations numériques. Ils explicitent la construction des hypothèses, leur façon d'analyser les résultats et de les accepter ou de les rejeter en fonction de leur cohérence avec les hypothèses initiales. Un des enseignements de l'expérience de ces modélisateurs de bassin est que la cohérence du modèle numérique avec le concept géologique est très importante. Il est ainsi préférable de bien prendre en compte les phénomènes au premier ordre plutôt que de rechercher une précision illusoire. Forcer les modèles à reproduire très précisément des données locales peut en effet être contreproductif pour l'objectif initial d'exploration du bassin sédimentaire.

Les outils de modélisation de bassin sont conçus pour construire des modèles géologiques et réaliser les simulations numériques associées. Toutefois des lacunes peuvent être observées dans l'accompagnement du modélisateur dans la mise en cohérence du modèle géologique avec les données numériques utilisées (ex : évolution géodynamique et modèle thermique du bassin sédimentaire). Ils requièrent souvent une organisation et une discipline personnelle importante pour assurer la cohérence d'éléments aussi divers que la géochimie de la roche-mère, l'analyse sédimento-stratigraphique, les propriétés mécaniques des roches, la géodynamique du bassin et son histoire thermique. Ce défi est encore plus grand lorsqu'il s'agit, en plus, de reproduire des données observées (ex : températures, pression dans les forages).

Cette première partie présente deux nouvelles méthodes visant à y apporter des solutions. Elles visent à aider les modélisateurs de bassin dans leur construction de modèle cohérents avec l'ensemble des données et avec les interprétations géologiques à leur disposition. Elles proposent ainsi des approches nouvelles pour mieux prévoir deux aspects clés de la modélisation de bassin : l'histoire thermique du bassin et la distribution de la richesse en matière organique dans les roches-mères qui le composent.

1.1 Calibration thermique des modèles de bassin

1.1.1 Contexte

La modélisation de bassin prend en compte la dynamique des processus interdépendants d'un système pétrolier afin d'estimer la quantité, la qualité et la localisation des accumulations de pétrole dans les bassins sédimentaires. Dans ce contexte, la détermination, à l'échelle du bassin, de l'évolution du champ de température au cours de son histoire géologique revêt une importance capitale. En effet, les travaux menés à partir du milieu du 20^{ème} siècle ont démontré (ex : McNab *et al.*, 1952 ; Pitt, 1961 ; Hoering et Abelson, 1963 ; Kartsev *et al.*, 1959 ; Philippi, 1965) puis raffiné (ex : Louis et Tissot, 1967 ; Ungerer *et al.*, 1986 ; Béhar *et al.*, 2008) la compréhension de l'influence du temps et de la température dans les processus de transformation de la matière organique en pétrole (se référer à Burrus, 1997 ou à Ducros, 2014, pour une synthèse de ces travaux). Leurs résultats ont permis de comprendre précisément de quelle manière ces deux variables contrôlent à la fois les masses d'hydrocarbure générées, leur qualité ainsi que la chronologie des événements de génération et de migration des hydrocarbures.

Avant l'émergence de la modélisation de bassin, l'histoire thermique d'un bassin était décrite à partir d'hypothèses simples, notamment via l'utilisation de gradients géothermiques constants dans le temps. Cette approche suppose l'absence de processus de convection ou d'éléments radioactifs et néglige tous les aspects de la dynamique des bassins sédimentaires (ex : rifts, sédimentation ou érosion rapide, tectonique...). La modélisation de bassin permet aux explorateurs d'utiliser ces informations afin de mieux contraindre l'histoire du champ de température et de lever les limitations liées à l'utilisation des gradients géothermiques. D'une part, elle permet l'utilisation de paléo-thermomètres tels que la réflectance de la vitrinite (ex : Burnham et Sweeney, 1989) ou les traces de fission de l'apatite, pour lesquels furent mis au point des modèles de leur évolution en fonction du temps et de la température. D'autre part, elle donne accès à la résolution de l'équation de la chaleur en temps et en espace, rendant possible l'estimation d'une évolution de la température plus réaliste. Il devient alors possible de tenir compte des variations (spatiales et temporelles) de température à la surface de la pile sédimentaire, des variations de flux de chaleur ou de température à la base du bassin sédimentaire et des propriétés thermiques des roches et de l'eau (compaction de la roche, conductivité thermique, capacité calorifique...). Elle permet enfin d'inclure des effets importants de la dynamique sédimentaire (érosions et sédimentation) et de la tectonique (rifts, fluage du sel...).

Dans la pratique les mesures, dans les puits, de température et de quelques paléo-thermomètres (réflectance de la vitrinite, traces de fission...) sont utilisées pour contraindre les paramètres thermiques des modèles de bassin. L'approche la plus fréquente repose sur l'utilisation d'un flux de chaleur à la base de la pile sédimentaire. La méthode consiste alors généralement, dans un premier temps, à supposer le flux de chaleur constant au cours du temps et à caler les températures observées aux puits. Dans un deuxième temps, les flux de chaleur passés sont ajustés, si besoin, à partir des paléo-thermomètres disponibles. Enfin, les flux de chaleurs sont interpolés spatialement à partir des valeurs aux puits de calibration afin d'obtenir des cartes de flux de chaleur au cours du temps. Cette approche fait donc l'impasse sur la modélisation explicite des variations de flux de chaleur liées à l'évolution de la lithosphère. De plus, elle néglige les effets de rétroaction de la sédimentation, du fluage du sel et de l'érosion (ex : Lucazeau et Le Douaran, 1985 ; Wangen, 1995 ; Van Wees *et al.*, 2009). Il en résulte souvent des modèles pour lesquels les paramètres numériques de simulation, c'est à dire les flux de chaleur à la base du modèle, ne sont pas nécessairement cohérents avec la dynamique globale du bassin sédimentaire.

Certains auteurs se sont intéressés à la dynamique des bassins sédimentaires et à ses conséquences sur les flux de chaleur à l'interface croûte – sédiments. Un résultat important fut apporté par McKenzie

Calibration thermique des modèles de bassin

(1978) qui formalisa les équations décrivant la variation du flux de chaleur au cours du temps à la base des sédiments consécutive à un amincissement de la croûte dans les périodes de rift. Toutefois, ces travaux se basent sur des hypothèses fortes (amincissement instantané de la croûte, non prise en compte de la perte des éléments radioactifs et absence de remplissage sédimentaire) afin de permettre un calcul analytique du flux de chaleur résultant. Ces hypothèses négligent ainsi des phénomènes, tels que les effets transitoires liés à la sédimentation ou la relaxation thermique de la lithosphère, ayant des effets importants sur les champs de température dans les bassins sédimentaires (Lucazeau et Le Douaran, 1985 ; Wangen, 1995 ; Burrus, 1997). D'autres chercheurs ont mis au point des modèles de reconstruction de l'évolution de la lithosphère sur la base du concept d'isostasie (modèles d'Airy ou de Pratt), c'est-à-dire d'un équilibre lithostatique des enveloppes superficielles de la terre (ex : Watts, 2001 ; Kooi *et al.*, 1992 ; Kusznir et Ziegler, 1992). Ces modèles fournissent des reconstructions, au cours du temps, de la géométrie de la lithosphère mais sans faire de lien avec un modèle de calcul de la thermicité.

Certains outils de modélisation de bassin (ex : TemisFlow, outil de modélisation de systèmes pétroliers développé par IFPEN) permettent d'inclure, en plus du modèle sédimentaire, l'évolution de la lithosphère dans la modélisation du bassin sédimentaire. On sait par ailleurs que la base de la lithosphère correspond à une modification importante des propriétés du manteau et à une température d'environ 1330°C. Il est alors possible de modéliser explicitement et de manière conjointe, l'évolution de la thermicité d'un bassin en intégrant les évolutions des dépôts sédimentaires et de la lithosphère sousjacente. L'évolution de la géométrie de la lithosphère et de ses propriétés est alors une donnée d'entrée de la simulation thermique. Cette approche est nettement préférable à l'utilisation de flux de chaleurs à la base de la pile sédimentaire, car l'histoire géologique du bassin est alors plus correctement prise en compte. En revanche la calibration aux données de puits par essai-erreur est potentiellement plus complexe car elle nécessite la modification du modèle géologique lui-même (c'est-à-dire l'évolution de la géométrie de la lithosphère ou de ses propriétés) plutôt que des valeurs numériques décorrélées d'une quelconque cause géologique.

Dès les débuts de la modélisation de bassin, des chercheurs se sont intéressés à la mise au point de modèles inverses, notamment pour la modélisation de la thermicité des bassins (ex : Lerche, 1988 ; 1989 ; 1993). Ces premières approches ont principalement formalisé et systématisé des modèles inverses incluant l'ensemble des paramètres d'entrée du modèle de bassin (soit plusieurs dizaines de paramètres). Ces travaux, très théoriques, n'ont pas trouvé écho dans les analyses pratiques des systèmes pétroliers pour lesquelles des paramètres clés, en nombre restreint et dont les effets sont facilement interprétables, sont utilisés pour calibrer efficacement les modèles par essai-erreur (ex : Waples, 1992a, b).

Afin de se rapprocher de ces méthodes pratiques de calibration des modèles thermiques, Gallagher (1998) a proposé une approche de calibration de l'historique de flux de chaleur qui vise à obtenir l'historique le plus simple compatible avec les données disponibles. Toutefois cette approche reste monodimensionnelle, ce qui ne permet pas de garantir de cohérence spatiale à l'échelle du bassin. Elle ne résout pas non plus les limitations liées à l'utilisation de flux de chaleur.

La mise au point des modèles tectono-stratigraphiques (ex : Rüpke *et al.*, 2008 ; Kooi *et al.*, 1992), cinématiques ou thermo-mécaniques (ex : McKenzie, 1978, Vejbaek, 1989 ; Cloething *et al.*, 1995 ; Van Wees et Beekman, 2000), qui apportent des informations précieuses à la construction de modèles de bassin incluant la modélisation de la lithosphère, aurait pu laisser penser que la calibration thermique des modèles de bassin deviendrait immédiate et implicite. Cela n'a toutefois pas été le cas pour deux raisons principales : ces modèles restent cantonnés à des applications en 1D ou en 2D ou ne proposent pas de couplage à des outils de modélisation de bassin. Van Wees *et al.* (2009) ont, par exemple, proposé d'ajouter l'information géologique et géodynamique dans une procédure d'inversion en intégrant un modèle d'isostasie locale et en considérant un nombre réduit de paramètres à inverser. L'approche suivie

est basée sur des modèles 1D indépendants, construits aux endroits où des observables sont disponibles. Elle intègre donc bien l'ensemble de l'information géologique locale mais n'assure pas la cohérence géologique régionale des résultats car les extrapolations des résultats de calibration au reste du bassin ne reposent pas sur l'information géologique contenue dans le modèle. L'approche la plus aboutie semble celle de Rüpke *et al.* (2008). Ces auteurs couplent un modèle thermique à un modèle tectono-stratigraphique en 2D. La modélisation inverse n'est toutefois effectuée que sur la position des sédiments (profondeur des différents horizons sédimentaires) et n'inclut pas les données thermiques aux puits. Le calage thermique du modèle ne fait ainsi pas directement partie de la procédure d'inversion qui continue à se faire par essai-erreur sur la base d'un modèle lithosphérique toutefois mieux contraint.

Afin d'exploiter au mieux les informations sur la dynamique du bassin et procédures de modélisation inverse décrites ci-dessus, une nouvelle méthode de calibration automatique de la température a été mise au point dans un outil de modélisation de bassin (Ducros, 2012). La méthode propose tout d'abord d'utiliser un modèle de bassin 3D complet décrivant l'évolution du bassin depuis le manteau supérieur jusqu'aux sédiments. Une première simulation de la thermicité du bassin est effectuée sur ce modèle. Les historiques de flux de chaleur aux droits des puits de forage obtenus par l'intermédiaire de ce premier modèle sont ajustés afin de reproduire les données disponibles par modélisation inverse. Enfin, les résultats de calibration sont extrapolés au reste du bassin sédimentaire sur la base de l'information géologique contenue dans le modèle numérique. L'idée essentielle de cette méthode concerne la façon d'utiliser l'information géologique régionale pour extrapoler les résultats de modélisation inverse aux puits de calibration. Elle vise ainsi à maximiser la qualité des prévisions de thermicité effectuées à l'échelle du bassin, tout en conservant une procédure suffisamment simple et acceptable par des modélisateurs. Cette méthode et l'idée d'utiliser les résultats bruts du modèle géologique initial pour extrapoler les résultats calibrés aux puits ont fait l'objet d'un brevet (Ducros, 2012).

1.1.2 Principes généraux de la calibration d'un modèle 3D de bassin

Simulation avec modèle lithosphérique

Le modèle lithosphérique proposé par défaut dans TemisFlow, l'outil utilisé pour mettre en œuvre cette approche, est représentatif de propriétés moyennes de la lithosphère à l'échelle du globe. Il propose une croûte de 32km d'épaisseur (dont 20km de croûte supérieure) et situe la base de la lithosphère 125km sous les sédiments. Dans la croûte, la production radiogénique subit une forte décroissance en fonction de la profondeur modélisée avec la formule suivante (Lachenbruch, 1970) :

Équation 1: $A(z) = A_0 \exp(-z/D)$

où A est la production radiogénique fonction de la profondeur z, A_0 est la production radiogénique en surface et D est l'épaisseur caractéristique de décroissance de la production radiogénique. Les propriétés du modèle de lithosphère par défaut de TemisFlow sont résumées au tableau 1.

Le flux de chaleur à l'équilibre du modèle de lithosphère par défaut en l'absence de sédimentation est de 57mW/m² dont 29mW/m² sont issus de la production radiogénique dans la croûte. Ceci est cohérent avec les estimations du flux de chaleur à l'interface croûte-sédiments et à leur décomposition entre une contribution crustale et un flux mantellique de base (pour une synthèse de travaux sur les flux de chaleur se référer à Husson et Moretti, 2000, et aux articles cités).

En l'absence de tout processus de sédimentation et de production radiogénique dans la croûte (flux de chaleur purement conductif), si l'on fait l'hypothèse d'une température à la base du manteau de 1330°C et d'une température de surface de 15°C, le flux de chaleur à l'interface sédiments/croûte est de 28mW/m², constant dans le temps. Ce dernier évolue de façon linéaire avec l'épaisseur de la croûte. Il descend ainsi à 14mW/m² dans le cas d'une croûte deux fois plus épaisse (64km de croûte et base du

manteau supérieur 157km sous les sédiments) et monte à 57mW/m² dans le cas d'une	croûte	deux fo	ois
plus fine (16km de croûte et base du manteau supérieur 109km sous les sédiments).			

Propriétés du modèle de lithosphère par défaut						
	Croûte supérieure	Croûte inférieure	Manteau supérieur			
Épaisseur	20 km	12 km	93 km			
Conductivité thermique à 20°C	3 W/m/°C	2 W/m/°C	3 W/m/°C			
Dépendance à la température	0,001 °C ⁻¹	0,001°C ⁻¹	0 °C-1			
Densité	2650 kg/m ³	2950 kg/m ³	3350 kg/m ³			
Capacité thermique massique	1150 J/Kg/°C	1030 J/Kg/°C	1200 J/Kg/°C			
Production radiogénique	3E-6 W/m ³	4,06E-7 W/m ³	0 W/m ³			
Décroissance de la production radiogénique en fonction de la profondeur	10000 m	10000 m	-			

Tableau 1 : Tableau récapitulatif des propriétés du modèle de lithosphère proposé par défaut dans TemisFlow.

La contribution radiogénique est fonction de l'épaisseur de la croûte. Il existe une décroissance de la production radiogénique en fonction de la profondeur (équation 1). Ainsi la contribution radiogénique au flux de chaleur total descend à 24mW/m² pour une croûte deux fois plus fine (16km) et monte à 30mW/m² pour une croûte deux fois plus épaisse (64km). La production radiogénique de la croûte dépend elle-même fortement du matériau qui la compose (par exemple le granite produit cent fois plus de chaleur que le basalte).

La modélisation montre également que dans un bassin en cours de sédimentation la dimension et les propriétés de la lithosphère, lorsqu'elles n'évoluent pas au cours du temps, n'ont pas d'effet notable sur les variations de flux de chaleur à la base de la pile sédimentaire. Ces variations sont donc uniquement liées aux processus sédimentaires eux-mêmes (taux de sédimentation, conductivité thermique des roches, érosion...).

Ces observations ne sont valables que lorsque l'épaisseur de la lithosphère est constante dans le temps. Lorsque se produit un rift deux phénomènes majeurs vont se combiner : une remontée du manteau supérieur suivie d'un rééquilibrage thermique progressif (relaxation thermique et retour des isothermes à leur position initiale) et un amincissement de la croûte avec pour conséquence majeure une diminution de la production de chaleur d'origine radiogénique. Les flux de chaleur à la base des sédiments vont donc être plus élevés dans les premiers temps du rift lors de la montée du manteau et des isothermes. La profondeur de remontée l'isotherme est contrôlée par l'intensité de l'amincissement (appelé Beta-factor) et par sa durée (du fait de la relaxation thermique). Une fois le système remis à l'équilibre, l'isotherme 1330°C retrouve sa position initiale. Le flux de chaleur à la base des sédiments est, lui, légèrement inférieur à sa valeur initiale du fait d'une croûte plus fine (moindre contribution radiogénique).

Il apparaît donc que dans un cas simple, sans rifting, une modification des paramètres décrivant la lithosphère (ex : production radiogénique, épaisseur de la croûte ou profondeur du manteau supérieur) conduit à une modification du flux de chaleur constante dans le temps. Les variations temporelles de flux de chaleur sont alors majoritairement liées à l'histoire sédimentaire du bassin. Cette observation

permet d'attribuer la valeur des flux de chaleur à la base du modèle sédimentaire (ou leur moyenne) à la définition du modèle lithosphérique, et à ses variations temporelles à l'histoire sédimentaire. Il devient ainsi possible de calibrer le modèle thermique par simple ajustement de la moyenne du flux de chaleur à la base des sédiments.

La première étape de la procédure proposée repose ainsi sur l'exploitation, dans TemisFlow, du modèle géologique 3D complet (lithosphère et sédiments) construit par le géologue. Lorsque ce dernier dispose d'un modèle de la lithosphère, il est intégré au modèle de bassin. Dans le cas contraire, le modèle de lithosphère par défaut, avec des propriétés et une géométrie constantes dans le temps, est utilisé. Dans cette démarche, les flux à l'interface sédiments-croûte ne sont plus imposés par l'utilisateur mais deviennent un résultat du modèle tenant compte des effets géologiques connus (sédimentation, érosion, distribution des propriétés thermiques...).

Une première simulation de l'évolution des champs de température dans le bassin est effectuée. Les flux de chaleur calculés à l'interface sédiments-croûte, et notamment leur évolution temporelle et spatiale, correspondent à la réponse thermique du bassin sédimentaire tel qu'il a été interprété par le modélisateur de bassin. Ils enregistrent ainsi toute l'information liée à l'histoire de la sédimentation (effet de « blanketing »), d'érosion, de variations latérales de conductivité thermique et à la géodynamique du bassin lorsqu'elle a été renseignée (rifts, subduction...). Ces informations temporelles et spatiales sont les données déterminantes du processus d'inversion et d'extrapolation décrit plus loin.

Inversion 1D aux puits

Les principaux objectifs de la calibration aux données sont la robustesse (définie ici comme l'obtention d'une solution géologiquement acceptable et d'aussi bonne qualité que ce qu'un modélisateur aurait pu obtenir par essais-erreurs) et la performance (l'ensemble de la procédure doit requérir un temps de simulation au plus équivalent à une procédure par essais-erreurs). Il est également attendu de la méthode de calibration qu'elle fournisse des informations sur l'incertitude de calibration. La méthode d'optimisation choisie est ainsi une méthode bayésienne développée à IFPEN, déjà appliquée à des cas de modélisation de réservoir (Schaaf *et al.*, 2009).

Après une première simulation fournissant les variations de flux de chaleur liées à l'évolution sédimentaire du bassin, la procédure de calibration va principalement consister en un ajustement de la moyenne du flux de chaleur. Les modèles géologiques monodimensionnels et les historiques de flux de chaleur associés sont tout d'abord extraits des résultats obtenus au droit de chaque puits où l'on dispose de données thermiques (température ou réflectance de la vitrinite). La méthode vise à ajuster l'historique de flux tout en préservant la cohérence avec le modèle géologique. Afin de reproduire une modification de définition de la lithosphère, l'ajout d'une constante (positive ou négative) donne un premier paramètre d'ajustement de l'historique de flux de chaleur. Toutefois, pour donner un degré de liberté supplémentaire à la procédure d'optimisation qui doit pouvoir reproduire à la fois des données de températures actuelles et des données de réflectance de la vitrinite, on permet un deuxième type d'ajustement. Il correspond à une modification du flux de chaleur sur un intervalle de temps limité, qui mime grossièrement un événement géologique, affectant la lithosphère, non pris en compte dans le modèle (ex : rift).

Les événements lithosphériques mal contraints, avec des effets significatifs sur la maturité des rochesmères, sont souvent peu nombreux dans l'histoire d'un bassin sédimentaire. Le nombre d'ajustements locaux permis est donc arbitrairement limité à deux afin de limiter le nombre de paramètres à optimiser et ainsi assurer la robustesse et la performance de la méthode. L'évolution temporelle des flux de chaleur à la base d'une colonne de cellule (un puits) pour laquelle on dispose de données de calibration est donc estimée par la formule suivante : Équation 2: $\Phi_i^*(x_i, y_i, t) = \Phi_i(x_i, y_i, t) + \Delta(x_i, y_i) + \delta_{i,1}(x_i, y_i, T_1) + \delta_{i,2}(x_i, y_i, T_2)$

où Φ_i est l'historique de flux de chaleur à la base des sédiments en un endroit (x_i, y_i) donné, Δ la correction « globale » apportée à l'historique de flux de chaleur (pour corriger une surestimation ou une sous-estimation de l'épaisseur de croûte par exemple) et les δ_i des corrections de flux de chaleur transitoires (surestimation ou sous-estimation d'un pic de flux de chaleur pendant un rifting par exemple) durant une période *T*. Les valeurs de Δ et des δ_i sont déduites par une procédure d'optimisation permettant d'obtenir l'historique corrigé de flux de chaleur Φ_i^* . Une analyse de sensibilité est effectuée préalablement à la procédure d'optimisation, afin de ne conserver que les paramètres avec un effet significatif sur la calibration thermique du modèle.

Cette étape permet ainsi des ajustements des historiques de flux de chaleur aux puits qui préservent la cohérence avec le modèle géologique proposé par le modélisateur de bassin. Plus le scénario géologique fourni reflète la « véritable » histoire géologique et moins les ajustements issus de l'inversion sont conséquents. Ces derniers permettent de compenser les lacunes du modèle géologique, sans toutefois en déterminer l'origine.

Estimation des cartes de flux de chaleur

Afin de construire un modèle prédictif de l'histoire thermique à l'échelle du bassin, à la suite de la modélisation inverse 1D, les résultats de l'inversion au niveau des puits sont utilisés conjointement aux cartes de flux de chaleur à la base des sédiments. Ces dernières sont extraites, pour chaque âge géologique, de la simulation 3D incluant le modèle lithosphérique. Peu d'études géostatistiques ont été effectuées sur les flux de chaleur dans les bassins sédimentaires. Dalla Rosa *et al.* (2012) ont effectué des tests pour déduire les cartes de flux de chaleur en couplant des informations de nature différente (données de flux de chaleur et carte de profondeur du bassin). Leurs résultats expérimentaux vont dans le même sens que des tests effectués en interne sur les portée des variogrammes. La procédure d'extrapolation sélectionnée dans notre approche est effectuée par co-krigeage co-localisé qui combine les informations locales aux puits de forage et les informations régionales de tendance contenue dans les cartes de flux de chaleur. La portée du variogramme choisie est de 100km et la corrélation est de 0,36 entre les deux variables. Les calculs sont effectués avec SGeMS, une boîte à outils géostatistiques développée par L'Université de Stanford (http://sgems.sourceforge.net/old/index.html).

1.1.3 Application au bassin de Berkine

Contexte géologique

Le bassin intracratonique de Berkine (ou bassin de Ghadamès), situé dans la partie sud-ouest de l'Algérie, constitue une vaste dépression Paléozoïque de plus de 100 000 km². Il est bordé à l'ouest par la dorsale d'Amguid et à l'est par le môle de Tihemboka. Au sud du bassin de Berkine se trouve le bassin d'Illizi dont il est séparé par le haut structural d'Ahara. L'Afrique du Nord constitue un ensemble stratigraphique homogène où les différents systèmes pétroliers sont principalement contrôlés par l'histoire tectonique de chacun des bassins régionaux. Les différents événements de déformation ayant eu lieu dans la région sont observables au travers des conséquences des différents soulèvements, discordances et érosions qui y sont associés (figure 1). Plusieurs découvertes pétrolières importantes ont été réalisées dans ce bassin et dans les bassins environnants, en faisant une province pétrolière de grande importance.



Figure 1 : Section géologique le long d'un transect nord-ouest sud-est du bassin de Berkine et des bassins voisins. Il présente les intervalles stratigraphiques majeurs pris en compte dans le modèle numérique. Modifiée de Popescu (1995), Galeazzi et al. (2010) et Ben Abdelkrim (2015).

Durant le Phanérozoïque le bassin de Berkine est marqué par des phases tectoniques multiples (Aliev *et al.*, 1971; Peterson, 1985; Boudjema, 1987; van de Weerd et Ware, 1994). Les principales déformations interviennent durant la phase panafricaine (Précambrien – Cambrien précoce), au Frasnien (Dévonien tardif), durant la phase hercynienne (Carbonifère à Permien), durant la phase autrichienne (discordance aptienne) et durant la phase alpine/atlasienne (de l'Éocène à l'Oligocène). Parmi tous ces événements, les principales discordances de la plate-forme saharienne sont associées aux collisions continentales bien marquées qui ont affecté l'Afrique du nord-ouest, à savoir les orogénies hercynienne et alpine. La phase hercynienne joue notamment un rôle majeur dans le bassin de Berkine et dans la zone située à l'ouest. Il semble également que l'activité volcanique et mantellique associée à la phase alpine soit en partie responsable de la maturité des roches-mères.

Description du modèle

Le modèle régional 3D est restreint au bassin de Berkine proprement dit et couvre une aire de 318km x 318km avec des mailles d'une résolution d'approximativement 6km de côté (figure 2). Le modèle est composé de 32 couches géologiques synthétisées au tableau 2. Un ensemble de plus de trente puits comportant des mesures de température et de réflectance de vitrinite est disponible pour la calibration thermique du bassin.

Ages (Ma)		Système	Unité stratigraphique	
530	510	Cambrien	Cambrien	
510	509		Tremadoc	
509	485	Ontervision	Arenig	
485	435	Ordovicien	Llandvim / Llandeilien	
435	434		Caradoc / Ashgil	
434	433		Llandovery	
433	410	Silurien	Wenlock	
410	409		Pridoli / Ludlow	
409	395		Gedinien	
395	390		Siegenien	
390	380		Emsien / Eifelien	
380	377		Givetien	
377	376	Devonien	Frasnien précoce	
376	367		Frasnien ("Hot shales")	
367	363		Famennien	
363	355		Strunien	
355	320	Carlonifian	Tournaisien / Namurien	
320	286	Carbonilere	Tiguentourine	
286	231		Orogène Hercynienne	
231	223	Taica	TAGI	
223	210	Trias	TINT	
210	208		TAGS	
208	187	Jurassique	Evaporites du Lias	
187	124		Malm/Dogger/Néocomien	
124	117		Erosion Autrichienne	
117	97		Albien	
97	90	Crétacé	Cénomanien	
90	89		Turonien	
89	42		Sénonien	
42	35		Erosion alpine	
35	0	Cénozoïque	Mio-Pliocène	

Tableau 2 : Découpage stratigraphique utilisé dans le modèle numérique. Seules les deux érosions susceptibles d'avoir des effets importants sur le système pétrolier (érosion hercynienne et érosion alpine) ont été intégrées au modèle.

De précédents travaux non publiés (Rudkiewicz *et al.*, 2003) ont montré que les données thermiques du bassin de Berkine, particulièrement bien renseigné, pouvaient être reproduites via l'application d'un flux de chaleur variable en espace et constant dans le temps, en moyenne de 62mW/m². Il y a également été montré que l'application d'un flux de chaleur constant dans le temps hormis durant les érosions hercyniennes et alpines améliore légèrement la calibration du modèle. Ce deuxième scénario rend le modèle plus cohérent avec la calibration thermique du bassin d'Illizi, plus au sud, pour lequel un pic de flux de chaleur est notamment nécessaire durant la phase alpine. Toutefois la capacité prédictive du

modèle dans les zones non contraintes par des données serait certainement améliorée en reliant plus étroitement histoire géologique et historique des flux de chaleur (ex : prévision de la maturité des rochesmères, historique de génération des hydrocarbures...).



Figure 2 : Illustration du modèle numérique 3D. Pour des raisons de confidentialité l'illustration ne comporte pas d'échelle ni de légende.

Dans le modèle régional retenu, en l'absence d'informations plus précises sur la lithosphère, c'est le modèle par défaut proposé par l'application TemisFlow (voir plus haut) qui est utilisé.

Utilisation des données de calibration

Dans ce travail, parmi la quarantaine de puits disponibles seule une partie est effectivement utilisée pour la calibration du modèle. L'idée est de conserver un certain nombre de puits pour évaluer la justesse de la calibration (figure 3). Parmi les puits disponibles, six contenant à la fois des données de températures et de vitrinite sont sélectionnés arbitrairement de manière relativement homogène sur l'ensemble du bassin. On dispose donc de données de calibration en quantité suffisante pour évaluer par validation croisée la capacité prédictive de l'approche. Par ailleurs, ce bassin ayant déjà fait l'objet d'une étude à IFPEN (Rudkiewicz *et al.*, 2003), les résultats obtenus via cette approche pourront être comparés à ceux obtenus par des modélisateurs experts dans le cadre de cette précédente étude. En plus de l'ajustement de la moyenne du flux de chaleur, un ajustement du flux de chaleur est permis durant chacun des deux épisodes majeurs d'érosion : les orogenèses hercyniennes (de -286 à -231 Ma) et alpines (de -42 à -35 Ma). Elles correspondent donc aux mêmes modifications de flux de chaleur que celles apportées dans le scénario de flux de chaleur décrit plus haut (Rudkiewicz *et al.*, 2003).

1.1.4 Résultats et discussion

Conformément à la méthode décrite précédemment, une première simulation est réalisée utilisant l'histoire sédimentaire, une histoire crustale par défaut (croûte thermique par défaut de TemisFlow) et une température de 1330°C à la base du manteau. De cette simulation sont extraites les cartes de flux de chaleur à chaque âge à la base des sédiments. Elles serviront de contrainte lors de l'interpolation des résultats de calibration aux puits, et les histoires de flux de chaleur à la base des sédiments au niveau de chacun des puits utilisés pour la calibration (figure 3). La figure 4 présente également un historique de flux de chaleur à la base des sédiments pour l'un des puits utilisés dans le modèle.



Calibration thermique des modèles de bassin

Figure 3 : Carte du flux de chaleur actuel à la base des sédiments obtenue par la simulation utilisant le modèle lithosphérique par défaut de TemisFlow. Les flux de chaleurs élevés sont en rouge (53mW/m²) et les flux de chaleur les plus faibles sont en bleu (47mW/m²). La carte montre également la position des puits contenant des données de températures et/ou de réflectance de la vitrinite. Les puits utilisés pour la procédure d'optimisation sont représentés par des triangles noirs. Les puits utilisés pour estimer la qualité des prévisions obtenues sont représentés par les cercles gris. Pour des raisons de confidentialité l'illustration ne comporte ni échelle ni légende.



Figure 4 : Exemple d'historique de flux de chaleur pour l'un des six puits sur le modèle initial non calibré, avec intégration du modèle lithosphérique. On voit apparaître les effets de la sédimentation et de l'érosion sur l'historique du flux de chaleur. Pour rappel, le modèle proposé par Rudkiewicz et al. (2003) utilise un flux de chaleur constant hormis durant l'érosion hercynienne (286-231Ma) et durant l'érosion alpine (42-35Ma).

Cet historique de flux de chaleur est ensuite modifié en intégrant les trois corrections possibles : une correction globale et deux corrections transitoires au moment des érosions alpine et hercynienne. La calibration est réalisée de manière indépendante pour chacun des puits. L'analyse de sensibilité montre que la modification du flux de chaleur durant l'érosion hercynienne n'a d'effet significatif que pour deux des six puits. Cela s'explique par un enfouissement plus important dans la suite de leur histoire géologique, qui masque les effets thermiques de cette érosion. Pour ces puits seuls les deux paramètres d'ajustement ayant des effets significatifs sont conservés dans la procédure d'optimisation.



Figure 5 : Comparaison entre les résultats de simulation (courbes) et les données de puits (points) pour les températures et réflectances de vitrinite. Les figures représentent l'évolution des propriétés en fonction de la profondeur pour l'un des six puits de la calibration. Les deux graphes de gauche représentent les courbes obtenues par la calibration automatique. Ceux de droite représentent les courbes obtenues par la calibration manuelle d'un expert en modélisation de bassin. Les deux modèles apparaissent très similaires et représentent aussi bien les données de puits.

Une fois la calibration effectuée, les résultats peuvent être comparés à la fois aux mesures de température et de vitrinite et à la calibration réalisée par le modélisateur expert. La figure 5 présente à la fois les résultats de la procédure de calibration automatique et ceux obtenus manuellement par le modélisateur dans la précédente étude non publiée. Les deux résultats sont très similaires et représentent aussi bien les données de puits. La méthode de calibration automatique basée exclusivement sur l'utilisation du modèle géologique permet donc d'atteindre une qualité aussi élevée qu'une approche par essai-erreur réalisée par un utilisateur expert. L'approche demanderait toutefois à être testée sur d'autres cas d'application pour en valider le bon fonctionnement.

Cette méthode de calibration, bien qu'automatique, permet d'obtenir des historiques de flux de chaleur avec un lien plus étroit avec la géologie car elle se base sur le modèle géologique fourni par le modélisateur (figure 6). La comparaison des flux de chaleur avant (figure 4) et après calibration (figure 6) fait clairement apparaître l'effet des trois corrections : une augmentation globale du flux de chaleur basal (moyenne auparavant autour de 50mW/m² et maintenant d'environ 56mW/m²) et une augmentation des flux de chaleur pendant les érosions hercyniennes (de 286 à 231Ma) et alpine (de 42 à 35Ma). Il est également possible de comparer les historiques de flux de chaleur à la base des sédiments entre la nouvelle méthode (figure 6) et la méthode manuelle (figure 7) qui n'assure pas le lien entre les événements géologiques et le flux de chaleur.



Figure 6 : Comparaison de l'historique de flux de chaleur avant (noir) et après calibration aux données de puits (rouge). On voit l'effet des trois corrections : une augmentation globale du flux de chaleur basal (moyenne auparavant autour de $52mW/m^2$ et maintenant d'environ $55mW/m^2$), une augmentation des flux de chaleur durant l'érosion alpine (42 à 35Ma) et une oblitération des effets de l'érosion hercynienne (286 à 231Ma)



Figure 7 : Comparaison de l'historique de flux de chaleur obtenu avec la méthode classique de calibration des données de puits (bleu) et avec la nouvelle méthode de calibration (rouge). On voit que le modélisateur a choisi des flux de chaleur constants dans le temps sauf pour les deux érosions majeures. Les variations de flux de chaleurs sont plus brutales, de plus grande amplitude et préservent moins bien le lien avec l'histoire géologique du bassin qu'avec la nouvelle méthode de calibration.

Une fois la calibration obtenue pour chacun des puits, il est possible d'estimer des flux de chaleur régionaux à chaque âge géologique sur la base d'un co-krigeage co-localisé des flux de chaleur calés aux six puits de calibration utilisés (points gris) à un âge donné et de la carte de flux de chaleur du même âge obtenue dans la simulation initiale avec le modèle lithosphérique. La figure 8 illustre cette estimation sur les flux de chaleur actuels estimés dans le bassin. Il est possible de comparer cette carte à celle initialement obtenue avec le modèle lithosphérique (figure 3). On voit clairement que la tendance régionale est conservée. En revanche la variabilité spatiale est nettement supérieure dans la nouvelle carte. Il est également possible de comparer les flux de chaleur obtenus par la méthode proposée (figure 8) à ceux préalablement obtenus lors de la précédente étude (figure 9). Des tendances similaires apparaissent à grande échelle avec des flux de chaleur plus faibles au centre du bassin que sur ses bordures. Il existe toutefois des différences importantes sur les flux eux-mêmes avec des valeurs bien inférieures avec la nouvelle méthode. Il existe également localement des différences de tendance de flux de chaleur qui s'expliquent facilement par la densité de puits utilisés (6 dans le cas de la nouvelle méthode et 40 dans le cas de la précédente étude).



Calibration thermique des modèles de bassin

Figure 8 : Carte du flux de chaleur actuel selon la nouvelle méthode de calibration des données de puits. Les résultats sont obtenus par co-krigeage co-localisé des flux de chaleur calés aux six puits de calibration utilisés (points gris) et de la carte de flux de chaleur présentée à la figure 3. Les valeurs des flux de chaleurs varient entre $42mW/m^2$ (en bleu) et $73mW/m^2$ (en rouge). Une validation croisée est réalisée pour estimer la confiance dans l'estimation de flux de chaleur dans les zones non-contraintes par les puits utilisés dans la procédure d'optimisation (notamment à l'ouest et au centre du bassin). Pour des raisons de confidentialité l'illustration ne comporte ni échelle ni légende.

Afin de mieux illustrer le potentiel d'amélioration des prévisions de température et de maturité des roches-mères dans les bassins sédimentaires, les erreurs quadratiques de prévision entre les prévisions obtenues avec la nouvelle méthode à partir de six puits, celles qui auraient été obtenues lors de la précédente étude à partir de ces six même puits et celles effectivement obtenues sur la base de l'ensemble des puits (erreur de référence) sont indiquées au tableau 3.



Figure 9 : Carte du flux de chaleur actuel obtenus par le modélisateur à partir de la calibration des 40 puits à sa disposition (points gris). Les valeurs des flux de chaleurs varient entre $42mW/m^2$ (en bleu) et $73mW/m^2$ (en rouge). Pour des raisons de confidentialité l'illustration ne comporte pas d'échelle ni de légende.

Somme des erreurs	Somme des erreurs	Somme des erreurs
quadratiques de référence sur	quadratiques de prévision sur	quadratiques de prévision sur
les 40 puits. Calibration	les 40 puits. Calibration	les 40 puits. Calibration avec la
manuelle sur les 40 puits	manuelle sur 6 puits	nouvelle méthode sur 6 puits
718	1398	903

Tableau 3 : Comparaison de la qualité de la prévision fournie par la nouvelle méthode de calibration thermique à celle du modèle de référence et à celle du modèle obtenu par calibration manuelle sur le même nombre de puits. Seuls 6 puits ont effectivement fait l'objet d'une calibration dans le test contre 40 dans le cas du modèle de référence. Si on compare la qualité de la prévision avec le même modèle n'utilisant que 6 puits de calibration, on constate que la nouvelle méthode améliore la prévision.

Les résultats montrent que pour un nombre identique de puits intégrés dans la procédure de calibration du modèle, la nouvelle méthode apporte une amélioration significative de la prévision. Ils montrent que la donnée secondaire issue du modèle géologique, et prise en compte dans le krigeage, ajoute effectivement de l'information. Cela suggère que la qualité des prévisions obtenues avec la nouvelle méthode tend plus vite vers le modèle idéal représenté par celui obtenu par l'expert avec l'ensemble des quarante puits de calibration. Toutefois il faudrait analyser cette convergence vers la solution en augmentant progressivement le nombre de puits de calibration.

Pour visualiser la qualité des prévisions obtenues par la méthode de calibration thermique, il est possible d'observer les prévisions sur les puits mis de côté pour la validation de la méthode. Le puits représenté

par le triangle noir sur la figure 8 fait par exemple apparaître des prévisions de flux de chaleur à la base de la pile sédimentaire relativement différents entre la nouvelle méthode et les résultats obtenus par le modélisateur de bassin expert. Pour autant, la figure 10 montre que ces conditions différentes aux limites du modèle aboutissent à des résultats similaires entre les deux approches de calibration.



Figure 10 : Comparaison entre les résultats de simulation (courbes) et les données de puits de forage (points) pour les températures et les réflectances de vitrinite pour le puits de forage signalé par le triangle noir de la figure 8. Les deux graphes de gauche représentent les courbes obtenues après extrapolation des flux de chaleur aux puits n'ayant pas fait l'objet d'une calibration spécifique (6 puits de calibration). Les deux courbes de droite représentent les résultats de la calibration manuelle d'un expert en modélisation de bassin (40 puits de calibration). Les deux modèles, bien qu'ayant des conditions thermiques différentes, représentent aussi bien les données de puits alors même que ce dernier n'est pas utilisé dans la procédure de calibration automatique.

1.1.5 Synthèse

Une nouvelle méthode de calibration thermique d'un bassin sédimentaire a été testée avec succès sur le cas du bassin de Berkine. Cette méthode s'appuie sur un modèle géologique *a priori* incluant un modèle lithosphérique. La calibration est réalisée de manière automatique sur les puits sur la base des flux de chaleur extraits du modèle *a priori*. La méthode tend à préserver autant que possible l'information géologique contenue dans le modèle.

La calibration, obtenue dans un temps très court (équivalent à trois simulations thermiques sur le modèle 3D), semble d'aussi bonne qualité que celle effectuée par un modélisateur expérimenté. La comparaison des températures prédites et mesurées sur les puits non pris en compte dans la procédure de calibration a permis de montrer que l'extrapolation des résultats de calibration à l'ensemble du bassin sédimentaire aboutit à des prévisions de très bonne qualité. En effet la prise en compte de l'évolution spatiale des flux de chaleur sur la base d'un modèle géologique *a priori* dans l'estimation des flux de chaleur régionaux permet de conserver la cohérence géologique. Cette amélioration des prévisions n'est toutefois valable que pour ce modèle du bassin de Berkine. De plus amples tests devront être effectués (nombre et position des puits pris en compte pour la calibration, bassin sédimentaire d'application...) pour tirer des conclusions plus générales.

La méthode ne vise pas à donner "la" solution au problème de calibration thermique du modèle de bassin mais à proposer un ajustement numérique le plus cohérent possible avec le modèle géologique construit par le modélisateur de bassin. Pour améliorer encore la robustesse de la méthode il est envisageable de fournir une évaluation de la qualité du modèle géologique *a priori* sur la base de l'amplitude et de la variabilité spatiale et/ou temporelle des corrections apportées dans la phase de calibration.

Le modèle résultant de la calibration des flux de chaleur aux puits correspond au modèle "le plus probable" (au sens de la vraisemblance utilisée dans l'approche d'inversion bayésienne). L'ensemble de l'information apportée par cette méthode d'optimisation (distribution *a posteriori* des flux de chaleur aux puits de calibration) n'a toutefois pas été exploitée dans ce travail. Il est envisageable d'utiliser les distributions de probabilité *a posteriori* afin de propager cette incertitude sur la paramètres du modèle sur les résultats thermiques de la modélisation de bassin et notamment sur la maturité des roches mères dans les zones non explorées.

Enfin, une des limitations de l'approche concerne les corrections apportées à l'historique de flux de chaleur. Même si dans notre application elles sont reliées à des événements géologiques (deux érosions majeures) rien ne permet de les expliciter géologiquement ni ne permet d'assurer qu'il existe en une représentation géologique. Afin d'assurer une meilleure cohérence du modèle les corrections pourraient être effectuées directement sur certains de ses paramètres physiques (épaisseur crustale au droit des puits, épaisseurs érodées, facteur d'amincissement crustal lors d'un rifting...). L'extrapolation des résultats à l'ensemble du modèle serait alors effectuée en combinant la carte *a priori* de la propriété physique considérée et sa valeur calibrée aux puits.

1.2 Détermination régionale de la richesse en matière organique d'une roche-mère

1.2.1 Contexte

Après avoir déterminé les champs de température dans le bassin pétrolier au cours de son histoire géologique, il est nécessaire de connaître le potentiel pétrolier initial des roches-mères (richesse de la matière organique) pour calculer les quantités d'hydrocarbures générées puis expulsées vers les réservoirs pétroliers.

Le potentiel pétrolier, c'est-à-dire la capacité maximale de production d'hydrocarbures par unité de roche-mère, est généralement caractérisé par deux valeurs : son contenu en carbone organique (TOC, exprimé en gramme de carbone par gramme de roche) et son indice d'hydrogène (IH, exprimé en mg d'hydrocarbures par gramme de carbone). Le produit de ces deux valeurs donne ce que l'on appelle traditionnellement le S2 (en mg d'hydrocarbures par gramme de roche). Cette valeur, qui caractérise le potentiel pétrolier massique d'une roche, est facilement utilisable pour déterminer un potentiel pétrolier régional à partir de l'épaisseur et de la densité de la roche.

A l'échelle d'un bassin pétrolier, qui peut atteindre plusieurs dizaines à centaines de milliers de kilomètres carrés, le TOC et l'IH peuvent fortement varier car ils dépendent en partie de la morphologie du bassin, de son paléoclimat et des conditions chimiques lors du dépôt de la roche-mère. Les hydrocarbures, sous l'effet de la poussée d'Archimède et des gradients de pression, ont tendance à remonter de la roche-mère vers la surface. Les puits de forage s'arrêtent ainsi souvent au niveau des réservoirs et ne parviennent que rarement jusqu'aux roches-mères. De ce fait, hormis dans les bassins ayant fait l'objet d'une vaste exploration des ressources non-conventionnelles, souvent localisées dans des roches-mères, les modélisateurs de bassin ne disposent généralement que de peu de puits ayant échantillonné la roche mère. En conséquence les incertitudes sur la distribution régionale de la matière organique et de son potentiel pétrolier sont généralement élevées et peuvent conduire à de grandes incertitudes lors de l'analyse du système pétrolier (Bagirov et Lerche, 1999).

Markwick (2011) décrit deux approches principales pour estimer la distribution de la richesse de la matière organique à l'échelle des bassins sédimentaires. D'une part les méthodes basées sur des bases de données volumineuses, sur des concepts de paléogéographie et sur des analogues (Scotese *et al.*, 2006, Bohacs *et al.*, 2008). Et, d'autre part, les modèles numériques 2D ou 3D (Schwarzkopf, 1993; Mann et Zweigel, 2008; Chauveau *et al.*, 2014 ; Granjeon et Chauveau, 2014). Ces derniers sont des outils puissants capables de prendre en compte les processus physiques de transport des sédiments, chimiques de dégradation de la matière organique et biologiques de production de cette matière organique. Par exemple, DionisosFlow, un outil de modélisation stratigraphique développé à IFPEN (Granjeon et Joseph, 1999; Chauveau *et al.*, in prep), est capable de traiter les processus de transport et de dépôt à la fois des sédiments et de la matière organique.

Leur usage par des modélisateurs de bassin reste toutefois limité du fait de leur complexité, du temps nécessaire pour réaliser les modèles et des connaissances en sédimentologie et en stratigraphie qu'ils requièrent. Par conséquent, les méthodes effectivement utilisées pour l'estimation du potentiel pétrolier régional sont souvent basées sur des quantités de données limitées et des approches mathématiques simples. Il s'agit par exemple de considérer la valeur moyenne en TOC des différents puits de forage ou d'utiliser des méthodes de krigeage sans dérive externe pour extrapoler les valeurs à l'ensemble du bassin sédimentaire. Ainsi, sauf dans les cas où la densité des données est suffisante (ce qui n'arrive pour ainsi dire jamais), l'estimation du potentiel pétrolier initial des roches-mères dans les modèles de

bassin ne tient aucunement compte des processus en lien avec sa distribution régionale, ce qui peut conduire à l'utilisation de données d'entrée fortement erronées.

Nous proposons une nouvelle approche pour fournir des cartes de potentiel pétrolier initial des rochesmères déposées en domaine marin en entrée des modèles de bassin. Cette approche n'utilise que des données déjà requises pour construire ou contraindre les modèles de bassin. Elle utilise des concepts de biologie (production de matière organique), de chimie et de géologie (dégradation de la matière organique avant enfouissement supérieur à quelques mètres) synthétisés par Chauveau (*in prep.*) et rappelés dans la section suivante. L'idée principale de cette méthode, qui a fait l'objet du dépôt d'un brevet (Ducros et Chauveau, 2015), repose sur un modèle inverse qui assure la calibration aux données de puits et permet l'extrapolation des résultats à l'échelle du bassin sédimentaire. Elle utilise pour cela des cartes de bathymétrie de dépôt et de vitesse de sédimentation de la roche mère. La méthode est illustrée sur un intervalle de deux millions d'années, riche en matière organique, de la formation Montney dans le bassin ouest canadien. Cette formation, riche en réservoirs non-conventionnels, a récemment fait l'objet d'une intense prospection pétrolière facilitant l'accès à des données de forage dans les roches-mères.

1.2.2 Méthode

Mécanismes de dépôt et de préservation de la matière organique dans les sédiments

Les valeurs de TOC et d'IH de la matière organique préservée dans les roches sédimentaires résultent d'un ensemble de processus biologiques, géochimiques et géologiques. Ils commencent dans la zone de production de la matière organique dans les océans et s'étendent jusqu'à la préservation de la matière organique dans les sédiments, après la fin des processus de dégradation contrôlés par la présence d'oxygène ou de sulfates. La méthode d'estimation du potentiel pétrolier régional intègre les lois empiriques proposées par Chauveau *et al. (in prep.)* que nous rappelons ci-dessous.

La production de matière organique marine s'effectue principalement dans la zone photique où l'on trouve à la fois de la lumière et des nutriments. Du fait des processus de recyclage et d'oxydation de la matière organique dans la colonne d'eau, seule une petite partie de cette matière organique parvient à sédimenter. Plusieurs équipes de recherche telles que celles de Martin *et al.* (1987) ou Armstrong et al. (2002) ont déterminé une loi empirique reliant ce flux de matière organique *Forg* (en g/m²/an) à la productivité primaire de matière organique dans la zone photique (*PP*₀, en g/m²/an) et à la bathymétrie (*z*, en m) à partir de mesures dans les océans actuels (figure 11). Chauveau *et al.* (*in prep.*) ont ensuite proposé une amélioration de la loi empirique afin de tenir compte de la production primaire (équation 3) :

Équation 3:
$$Forg(z) = 0.409 \cdot PP_0^{1.41} \cdot \left(\frac{z}{100}\right)^{-0.858}$$



Figure 11 : Évolution de la production primaire de matière organique en fonction de la profondeur. La loi empirique est calée sur des mesures dans les océans actuels (Martin et al., 1987).

Cette équation fait apparaître une forte décroissance du flux de matière organique dans les premières centaines de mètres de colonne d'eau. En dessous de 1000 mètres de profondeur, l'évolution du flux de matière organique avec la profondeur devient négligeable. Les endroits les plus favorables au dépôt de matière organique sont par exemple les bordures continentales des bassins sédimentaires, où la bathymétrie est modérée. La contribution de la production primaire est non linéaire, ce qui s'explique par un phénomène de saturation des capacités de dégradation de la matière organique avec l'augmentation de la production primaire.

Efficacité de préservation par les processus de sédimentation

La matière organique qui parvient au fond de l'océan participe au processus de sédimentation. La sédimentation inorganique a un double effet sur la teneur en carbone des roches (souvent exprimée via la teneur en carbone organique) : elle dilue la matière organique dans les roches sédimentaires et elle préserve la matière organique des effets de la dégradation microbienne. En effet, plus la sédimentation est élevée et plus est court le temps de résidence de la matière organique dans les premiers mètres de la colonne sédimentaire, où intervient la deuxième phase de dégradation, liée à l'activité aérobie ou sulfato-réductrice des micro-organismes. Les TOC préservés dans les roches sédimentaires dépendent ainsi très fortement de l'efficacité de la préservation par les processus de sédimentation.

La deuxième phase de dégradation, lors des premiers mètres d'enfouissement, dépend essentiellement des conditions oxydo-réductrices du fond des océans et du taux de sédimentation, qui contrôle le temps de résidence dans la zone de dégradation. Betts et Holland (1991) ont proposé un premier modèle empirique de dégradation dans les premiers mètres d'enfouissement, basé uniquement sur le taux de sédimentation. Plus récemment, Mann et Zweigel (2008) ont amélioré l'approche en tenant également

compte du niveau d'oxygénation du fond océanique. Le modèle inverse repose sur une mise à jour, proposée par Chauveau *et al.* (2014), de cette dernière approche (équation 4).

Équation 4: $BE = 10^{(0.1217 \cdot \log(V_S) + 1.4613)} \cdot (1 + 40 \cdot Ox \cdot Vs^{-1/4})^{-4/3}$

Où *BE* est l'efficacité de préservation de la matière organique liée à l'enfouissement, *Vs* est le taux de sédimentation (m/Ma), et *Ox* est l'indice d'oxygénation du milieu (variant de 0 pour un milieu complètement anoxique à 1 un milieu bien oxygéné). La figure 12 montre que *BE* est fortement contrôlé par le niveau d'oxygénation du milieu lorsque que les taux de sédimentations sont faibles. En revanche, cette influence disparaît totalement pour les très forts taux de sédimentation. Il est toutefois à noter que les roches-mères marines se déposent généralement dans des zones où les taux de sédimentations sont relativement faibles (<50m/Ma).



Figure 12 : Efficacité de la préservation liée à l'enfouissement en fonction du taux de sédimentation, pour différents niveaux d'oxygénation variant d'un milieu très oxygéné (bleu) à un milieu anoxique (rouge). Chauveau et al. (2014).

Conditions d'oxygénation du milieu océanique

Dans le domaine marin d'un bassin sédimentaire, le niveau d'oxygénation varie en temps et en espace. Il dépend notamment de conditions paléoclimatiques ou de paléo-courants de fond qu'il est relativement difficile d'appréhender. Une première approche, pragmatique, consiste à déterminer une loi empirique basée sur l'équilibre entre renouvellement et consommation d'oxygène et calibrée sur des mesures dans les océans actuels. Au premier ordre, le niveau d'oxygénation est le résultat de l'équilibre entre la consommation d'oxygène liée à l'activité biologique dans la colonne d'eau et le renouvellement d'oxygène contrôlé par le brassage des eaux par les vents ou les courants. En d'autres termes, le niveau

Détermination régionale de la richesse en matière organique d'une roche-mère

d'oxygénation du fond de l'eau dépend principalement de la hauteur de la colonne d'eau et de l'activité biologique. A l'état stationnaire, cela revient à exprimer le niveau d'oxygénation sous la forme :

Équation 5:
$$\frac{dOx_Z(z)}{dt} = M(z).(1 - Ox_Z(z)) - D(z).Ox_Z(z) = 0$$

où D(z) = f(Forg(z)) représente le taux de consommation de l'oxygène et M(z) son taux de renouvellement. M(z) et D(z) ont été calibrées via l'utilisation de données dans les océans modernes (World Ocean Atlas 2005) et notamment dans les zones de remontée des eaux de fond (sur la marge du Pérou par exemple).



Figure 13 : Évolution de l'indice d'oxygénation du fond de l'eau en fonction de la bathymétrie, pour des productions primaires en matière organique variant de 50 à 400 gC/m²/an (Chauveau et al., in prep.). On voit clairement apparaître l'effet de la productivité primaire sur le niveau d'oxygénation global : plus elle est élevée et plus le fond marin est appauvri en oxygène. Pour une valeur de production primaire fixée, le niveau d'oxygénation atteint un minimum autour de 200m de bathymétrie avant de remonter progressivement du fait des courants marins de fond. Chauveau et al. (2014)

La figure 13 montre les courbes d'évolution des niveaux d'oxygénation déduites de ce modèle dans un milieu de fort renouvellement des eaux. L'effet de la productivité primaire sur le niveau d'oxygénation global apparaît clairement : plus elle est élevée, plus il faut d'oxygène pour dégrader la matière organique dans la colonne d'eau et plus le fond marin est appauvri en oxygène. Après un minimum autour de 200m de bathymétrie, le niveau d'oxygénation remonte progressivement en fonction de l'activité des courants marins de fond. Le modèle tient également compte de l'intensité de ce renouvellement des eaux par l'intermédiaire d'un modulateur de niveau de brassage des eaux *Ox* pour la détermination du niveau effectif d'oxygénation du milieu océanique :

Équation 6: $Ox = Ox_Z \cdot Ox_0$

Dans un milieu océanique ouvert où le brassage des eaux se fait correctement, Ox_0 prend des valeurs proches de 1 alors que dans les zones telles que des mers fermées, où le niveau de brassage des eaux est réduit, Ox_0 tend vers 0.

Détermination du TOC et de l'HI

Une fois qu'a été déterminée la quantité de matière organique déposée et préservée après les deux phases de dégradation, il est possible d'estimer la quantité de carbone organique présent dans la roche sur la base d'une simple conversion du pourcentage volumique de matière organique dans la roche en TOC massique. Cette conversion est effectuée via l'équation suivante :

Équation 7:
$$TOC_0 = Forg \cdot BE \cdot \frac{\rho_{M.O.}}{\rho_S} \cdot \% C_{M.O.}$$

où:

- $\rho_{M,O}$ correspond à la densité de la matière organique (en kg/m³);
- ρ_s correspond à la densité des sédiments (en kg/m³);
- $%C_{M.O.}$ est la teneur en carbone de la matière organique (qui peut varier entre 60% et 90% selon le type de matière organique).

Afin d'estimer correctement le potentiel d'une roche-mère, on estime également la valeur initiale de l'IH de la matière organique (HI_0) avec la formule proposée par Mann et Zweigel (2008) :

Équation 8:
$$HI_0 = HI_{\text{Res}} + (HI_{Max} - HI_{\text{Res}}) \cdot (P/100)^{\gamma}$$

où:

• *P* représente le taux de dégradation globale de la matière organique depuis sa production jusqu'à sa dégradation successivement dans la colonne d'eau et lors de son enfouissement précoce (équation 9);

Équation 9 :
$$P = \frac{Forg}{PP_0} \cdot BE$$

- *HI_{res}*, *HI_{max}* sont respectivement les valeurs minimales et maximales d'IH pour une matière organique marine (c.à.d. respectivement l'IH d'une matière organique très dégradée et d'une matière organique marine parfaitement préservée);
- γ est un paramètre empirique contrôlant l'effet du niveau global de dégradation de la matière organique sur l'IH déterminé sur la base de mesures sur des roches-mères. Il est généralement fixé entre 0,1 et 0,2 (Mann et Zweigel, 2008).

Le modèle proposé permet donc de déterminer le potentiel pétrolier initial des roches-mères (avant tout processus de transformation thermique de la matière organique), indépendamment de toute considération d'âge, de paléogéographie ou de paléoclimat, à partir d'une valeur de production primaire, d'un indice de renouvellement des eaux de fond et des informations de bathymétrie et de taux de sédimentation.

1.2.3 Modèle inverse local et extrapolation à l'échelle du bassin

Il existe des outils, tels que le Rock-Eval, développé à IFPEN et couramment utilisé dans l'industrie pétrolière, qui permettent de mesurer les valeurs de TOC et d'IH actuels des échantillons de roche

Détermination régionale de la richesse en matière organique d'une roche-mère

prélevés sur des affleurements ou dans des puits de forage. Ces échantillons peuvent avoir subi, au cours de leur histoire géologique, des transformations thermiques aboutissant à la génération des fluides hydrocarbures et par conséquent à la diminution des valeurs de TOC et d'IH par rapport à leurs valeurs initiales avant transformation thermique. Les données acquises sont utilisées pour estimer la distribution locale du potentiel pétrolier par les modélisateurs de bassin après correction de l'effet de maturation thermique. Cette correction est généralement effectuée sur la base d'un bilan carbone et d'une hypothèse sur l' HI_0 de la matière organique (ex : Jarvie, 2012; Romero-Sarmiento *et al.*, 2013). Il est ainsi possible de calculer une valeur de TOC₀ à partir de l'équation suivante :

Équation 10:
$$TOC_0 = \frac{TOC_{PD} - (S1 + TOC_{PD} \times HI_{PD}) \times \%C_{HC}}{1 - HI_0 \times \%C_{HC}}$$

où:

- TOC₀ correspond à la valeur de TOC initial (g de carbone organique /g de roche) ;
- TOC_{PD} correspond à la valeur mesurée de TOC (g de carbone organique /g de roche) ;
- S1 est la quantité d'hydrocarbures piégés dans la roche (g d'hc /g de roche);
- %C_{HC} est la teneur en carbone des hydrocarbures (g de carbone organique /g d'hc);
- HI₀ est l'indice d'hydrogène initial de la matière organique (g d'hc/ g de carbone) ;
- HI_{PD} est l'indice d'hydrogène mesuré (g d'hc / g de carbone).

Cette méthode d'estimation locale du potentiel pétrolier initial nécessite une hypothèse sur la valeur de l' HI_0 . L'originalité de la méthode est de s'appuyer sur le cadre général de dépôt et de préservation de la matière organique décrit à la section précédente pour améliorer l'estimation du potentiel pétrolier local des roches-mères marines sur la base des données de Rock-Eval. Elle permet, par la suite, de l'extrapoler au reste du bassin sédimentaire en utilisant l'information géologique régionale. Comme les modèles de bassin utilisent la description de la bathymétrie et de la vitesse de sédimentation des couches sédimentaires au cours des temps géologiques pour modéliser les systèmes pétroliers, nous disposons des informations nécessaires au calcul du potentiel pétrolier initial local et à son extrapolation régionale.

En utilisant l'approche décrite à la section précédente, si l'on dispose d'un couple (PP_0, Ox_0) , on peut estimer une valeur de HI_0 en chaque endroit du bassin. Il est alors possible d'injecter cette valeur dans l'équation 10, pour en déduire une valeur de TOC_0 en accord avec le bilan carbone que l'on peut comparer à la valeur simulée de TOC_0 obtenue avec les concepts de dépôt et de préservation de la matière organique marine. Dans cette dernière approche, les valeurs de hauteur de colonne d'eau et de vitesse de sédimentation sont directement issues du modèle géologique du bassin sédimentaire et sont donc considérées comme des données « dures ». Il est alors possible de modifier les valeurs de PP_{θ} et de Ox_{θ} afin de faire converger les deux valeurs de TOC₀, calculé et simulé, vers une même valeur. On met donc en œuvre une boucle d'optimisation sur les valeurs de PP_0 et Ox_0 afin de minimiser l'écart entre les TOC_{θ} calculé et simulé sur l'ensemble des puits pour lesquels on dispose de mesures. On fait l'hypothèse que PP_0 et Ox_0 sont constants sur l'ensemble du bassin, c'est-à-dire que la modification des valeurs de PP_{θ} et Ox_{θ} est effectuée pour tous les puits à la fois dans la procédure d'optimisation. Cette hypothèse permet, par la suite, d'extrapoler les résultats à l'ensemble du bassin et ainsi déterminer le potentiel pétrolier initial à l'échelle du bassin sédimentaire. La fonction coût à minimiser pour obtenir les valeurs de PP_0 et Ox_0 cohérentes à la fois avec les informations géologiques et les données de puits est la suivante :

Équation 11:
$$OF = \sum_{k=1}^{nb} (TOC_{0S} - TOC_{0C})^2$$

où :

- OF est la fonction coût à minimiser ;
- *TOC*_{0S} est simulé par la méthode génétique décrite à la section précédente ;
- $TOC_{\theta C}$ est obtenu en injectant l'HI $_{\theta}$ simulé selon l'équation 8 dans l'équation 10 ;
- *Nb puits* est le nombre de puits de forage pour lesquels on dispose de mesures.



Figure 14 : Vue schématique de la procédure d'inversion. Elle débute par une première simulation du potentiel pétrolier (TOC_0 et HI_0) sur la base d'une part du modèle géologique (bathymétrie et vitesse de sédimentation) considéré comme fixe et, d'autre part, des conditions biologiques (PP_0) et chimiques (Ox_0) considérées dans notre approche comme des paramètres à optimiser. La valeur simulée de HI_0 est utilisée dans l'équation du bilan carbone sur la base des mesures sur l'état actuel de la roche-mère (TOC_{PD} et HI_{PD}). L'écart entre les deux valeurs de TOC_0 est ensuite utilisé comme critère de convergence de la boucle d'optimisation vers le couple (PP_0 , Ox_0) qui rend l'ensemble cohérent. Modifié de Ducros et Chauveau (2015).

La figure 14 récapitule l'ensemble de la procédure de modélisation inverse permettant d'obtenir le couple de valeur (PP_0 , Ox_0) reproduisant au mieux les observations. A la fin, la procédure d'optimisation

Détermination régionale de la richesse en matière organique d'une roche-mère

fournit le couple (PP_0, Ox_0) qui rend l'ensemble des données le plus cohérent possible avec le modèle géologique. L'hypothèse de valeurs de PP_0 , de Ox_0 homogènes sur l'ensemble du bassin, permet ensuite une estimation régionale du potentiel pétrolier de la roche-mère considérée. Les cartes régionales de vitesse de sédimentation et de bathymétrie servent donc de support à l'interpolation sur la base des concepts de dépôt et de préservation de la matière organique marine.

1.2.4 Application au cas de la formation Montney (Bassin ouest canadien)

Contexte géologique

Le bassin ouest canadien est un bassin pétrolier prolifique qui s'étend sur 1 400 000 km².Il contient à la fois des prospects conventionnels et non-conventionnels. La formation Montney a récemment fait l'objet d'une intense exploration pétrolière en vue de l'exploitation de ses différents réservoirs non-conventionnels.

L'intervalle géologique étudié correspond à un intervalle de temps de 2 million d'années dans le Triasique moyen qui a vu le dépôt d'une partie riche en matière organique de la formation Montney. Il est préservé dans le bassin d'avant pays et dans la zone de la cordillère canadienne et a été érodé à l'est du bassin (figure 15). Il est actuellement enfoui sous une couche de 4000m de sédiments dans la partie ouest du bassin, la plus profonde, et par une série de 500m d'épaisseur dans la partie est du bassin.



Figure 15: Vue en coupe Ouest-Est du bassin ouest canadien (modifié de Ducros et al., 2017)

Crombez *et al.*, (2016b) suggèrent que la formation Montney s'est déposée dans un domaine dominé par l'action des vagues dans un bassin relativement peu profond (bathymétrie maximale autour de 300m). L'intervalle étudié est, lui, majoritairement constitué de faciès distaux à proximaux et contient

quelques enregistrements d'événements turbiditiques. Très peu de dépôts d'environnement côtier ont été préservés (Zonneveld *et al.*, 2010 ; Crombez, 2016).



Figure 16 : Position de la zone étudiée (Crombez et al., 2016)

Dans l'intervalle sédimentaire étudié, les TOC massiques mesurés varient de 0.25 à 4% alors que les valeurs d'HI s'étalent entre 50 et 500 mg d'hydrocarbure/g de carbone (Riediger *et al.*, 1990; Ibrahimbas et Riediger, 2004). Ces fortes variations de l'indice d'hydrogène sont principalement liées au différentiel de maturité thermique entre la zone la plus enfouie à l'ouest et la zone la plus en surface à l'est (Rokosh *et al.*, 2012). Crombez *et al.* (2016a) ont montré le lien entre le niveau d'anoxie du bassin, la productivité primaire de matière organique et la stratigraphie en menant une étude intégrant des données de géochimie organique, des éléments traces, et une étude de la stratigraphie du bassin.

La zone modélisée dans cette application de la méthode correspond exclusivement à l'aire de dépôt de la formation Montney, plus restreinte que l'ensemble du bassin sédimentaire. Elle mesure 1000km de long et 500km de large et est orientée parallèlement au front de déformation (figure 16). Les mailles du modèle ont une résolution de 10km.

Données de potentiel pétrolier dans les puits de forage

Les mesures du potentiel pétrolier proviennent de cuttings de sept puits ayant échantillonné la formation Montney (tableau 4). La carte de bathymétrie (figure 17) montre la morphologie du bassin au moment du dépôt de l'intervalle sédimentaire considéré. La carte de vitesse de sédimentation a été déduite du travail d'analyse stratigraphique réalisé par Crombez (2016a) qui a permis d'en déterminer l'épaisseur et la durée nécessaire à son dépôt (figure 18).

Position en l (n° de cellule)	Position en J (n° de cellule)	TOC_{PD} (gC/gRoche)	<i>HI_{PD}</i> (mgHC/gC)
10	58	1.36	0
10	57	1.39	52
12	57	1.49	143
15	48	1.52	21
17	44	1.66	59
21	39	1.02	105
23	43	0.64	182

Détermination régionale de la richesse en matière organique d'une roche-mère

Tableau 4 : Position relative des puits de forage et mesures de potentiel pétrolier



Figure 17: Carte de bathymétrie au moment du dépôt de l'intervalle considéré sur l'ensemble du bassin (m). Les valeurs positives correspondent à des hauteurs de colonne d'eau. La carte a été filtrée de sorte de ne présenter les bathymétries que dans le domaine marin (modifiée à partir de Crombez, 2016a).



Figure 18: Carte de vitesse de sédimentation sur l'ensemble du bassin (m/Ma) (modifiée à partir de Crombez, 2016a). La carte a été filtrée de sorte de ne présenter les vitesses de sédimentation que dans le domaine marin. (modifiée à partir de Crombez, 2016a).

1.2.5 Résultats et discussion

Détermination des cartes de TOC et HI initiaux

La procédure d'inversion décrite à la section précédente a été appliquée aux données de l'intervalle riche en matière organique de la formation Montney présentées ci-dessus. Le potentiel pétrolier initial calculé aux puits utilisés pour l'optimisation est présenté au tableau suivant :

		TOC _{OS}	HI _{os}	TOC _{OC}	TOC_{PD}	HI_{PD}
Position en I	Position en J	(gC/gRoche)	(mgHC/gC)	(gC/gRoche)	(gC/gRoche)	(mgHC/gC)
10	58	2.15	455	2.20	1.36	0
10	57	2.12	447	1.99	1.39	52
12	57	2.05	457	1.99	1.49	143
15	48	2.60	494	2.48	1.52	21
17	44	2.49	533	2.70	1.66	59
21	39	1.21	549	1.58	1.02	105
23	43	1.15	547	0.88	0.64	182

Tableau 5 : Tableau récapitulatif des potentiels pétroliers simulés, calculés et mesurés

Un indicateur classique est utilisé afin de se rendre compte de la qualité de la prévision du potentiel pétrolier initial effectuée. Il s'agit de l'écart au sens des moindres carrés entre les TOC_0 simulés et calculés (équation 12). Les résultats obtenus avec le modèle inverse aboutissent à une valeur de 2 grammes de carbone par gramme de roche ce qui correspond à environ 10% des valeurs de TOC estimées (environ 2% de TOC), soit une valeur proche de l'incertitude sur la mesure. Les prévisions

sont donc d'excellente qualité alors même que les données utilisées correspondent à des échantillons de maturité variable.

Équation 12:
$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{nb_puits} (TOC_{0S} - TOC_{0C})^2}{nb_puits}}$$

Les résultats suggèrent que le potentiel pétrolier initial varie de 5g d'hydrocarbures par gramme de roche dans les zones les plus proximales jusqu'à près de 15g d'hydrocarbures par gramme de roche dans les zones les plus riches en matière organique. La figure 19 montre que les zones ayant les teneurs en carbone organique les plus élevées correspondent aux zones de bathymétrie moyenne (entre 60 et 100m), pour lesquelles la dégradation de la matière organique dans la colonne d'eau est faible, et à des taux de sédimentation de 50m/Ma, permettant une bonne préservation sans forte dilution. Les valeurs de HI semblent, elles, beaucoup plus homogènes sur l'ensemble du bassin. Les valeurs vont de 550 mg d'hydrocarbures par gramme de carbone dans le domaine proximale, où la dégradation a été la plus faible, jusqu'à 400 mg d'hydrocarbures par gramme des valeurs d'HI beaucoup plus faibles autour de 400 mg d'hydrocarbures par gramme de carbone (figure 20).



Figure 19: TOC_0 simulé (% massique). La zone en blanc correspond à la partie du bassin située en domaine continental et pour laquelle il n'y a donc pas de dépôt de matière organique marine. Les axes correspondent aux indices des mailles (I en vertical et J en horizontal).



Figure 20: HI_0 simulé (mg d'hydrocarbures /g de carbone). La zone en blanc correspond à la partie du bassin située en domaine continental, pour laquelle il n'y a donc pas de dépôt de matière organique marine. Les axes correspondent aux indices des mailles (I en vertical et J en horizontal).

Evaluation de la robustesse de la méthode

L'objectif étant de fournir une méthode d'estimation du potentiel pétrolier initial d'une roche-mère qui soit robuste et prédictive, la robustesse de la méthode est évaluée par validation croisée. Une partie des données de puits est conservée tandis que la modélisation inverse est réalisée sur les puits restants. Les puits mis de côté sont utilisés pour estimer la qualité de la prévision. Dans notre cas nous ne connaissons pas le véritable potentiel pétrolier aux puits. La comparaison est effectuée avec la valeur obtenue par la prévision utilisant l'ensemble des données disponibles.

Position en I	Position en J	<i>TOC</i> ⁰ simulé avec 7 puits	HI_0 simulé avec 7 puits	TOC_0 prédit avec 6 puits	HI_0 simulé avec 6 puits	Écarts relatifs de TOC ₀ (%)
10	58	2,15	455	2,14	455	0,5
10	57	2,12	447	2,14	447	-0,9
12	57	2,05	457	2,06	457	-0,5
15	48	2,60	494	2,64	494	-1,5
17	44	2,49	533	2,44	533	2,0
21	39	1,21	549	1,19	549	1,7
23	43	1,15	547	1,16	547	-0,9

Tableau 6 : Comparaison des TOC_0 et HI_0 simulés obtenus avec 7 puits et des moyennes des TOC_0 et HI_0 prédits sur la base de 6 puits.

Les mesures correspondant à un puits sont d'abord laissées de côté et la modélisation inverse est réalisée avec le jeu de six puits restants. Cette opération est réalisée autant de fois que nous disposons de puits. Les résultats obtenus sont ensuite moyennés et synthétisés au tableau 6.

Détermination régionale de la richesse en matière organique d'une roche-mère

Une évaluation de la capacité prédictive du modèle est également effectuée sur le même principe qu'avec l'équation 13 en comparant les TOC_0 obtenus avec 6 et 7 puits sur l'ensemble des procédures d'optimisation. La très faible erreur obtenue (0,3 gramme de carbone par gramme de roche) suggère que les résultats ne sont que très peu sensibles à une mesure en particulier et qu'ainsi la prévision ne dépend pas majoritairement d'un unique puits.

Équation 13:
$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{nb_puits} (TOC_{0S_7puits} - TOC_{0C_6puits})^2}{nb_puits}}$$

Nous disposons, dans le cas du bassin ouest canadien, d'une quantité de données que les explorateurs de bassin pétrolier n'ont généralement pas à leur disposition. En effet, dans des bassin en domaine océanique, où la roche-mère est profonde, ou dans les bassins faiblement explorés, les données disponibles sont généralement en quantité bien plus réduite. Il est donc important de déterminer la capacité prédictive du modèle en se plaçant dans une situation où peu de données sont accessibles.

La procédure d'inversion est donc de nouveau utilisée mais avec les données issues d'un unique puits à chaque fois. Les valeurs aux six puits non utilisés sont comparées à celles prédites après extrapolation des résultats d'optimisation à l'ensemble du bassin. Dans ce cas les prévisions, bien que bonnes en regard de la quantité de données utilisées, sont nettement plus variables. Les cas les plus extrêmes sont présentés au tableau 7. Ils correspondent aux prévisions faites sur la base des puits (10,57), qui donnent presque les mêmes résultats que lorsqu'on utilise l'ensemble des puits, et du puits (21, 39), qui donnent des valeurs nettement plus éloignées (respectivement 0,7 et 10,5 grammes de carbone par gramme de roche d'erreur selon l'équation 14). On peut tout de même noter que la tendance reste similaire (les zones les plus riches en matière organique restent les mêmes). Cela signifie que la prévision reste au moins qualitativement correcte, ce qui peut déjà être une information très appréciable dans les premiers stades de l'exploration d'un bassin pétrolier. D'autant plus que même pour le puits fournissant les moins bonnes prévisions, les erreurs sur l'estimation du TOC_0 sont d'environ 50% ce qui correspond à des intervalles d'incertitudes communément employés dans les analyses de risque faites en modélisation de bassin (ex : Bagirov et Lerche, 1999 ; Schwarzkopf, 1993).

Position en I	Position en J	TOC_{θ} prédit avec le puits (10,57) et erreur relative (%)	TOC_{θ} prédit avec le puits (21,39) et erreur relative (%)	TOC_0 prédit avec les puits (21,39) et (10,57) et erreur relative (%)	<i>TOC</i> ⁰ prédit avec les 7 puits
10	58	2,23 (3,7)	3,40 (58,1)	2,34 (8,8)	2.15
10	57	2,20 (3,8)	3,37 (59,0)	2,30 (8,5)	2.12
12	57	2,12 (3,4)	3,22 (57,1)	2,22 (8,3)	2.05
15	48	2,69 (3,5)	3,94 (51,5)	2,82 (8,5)	2.60
17	44	2,55 (2,4)	3,55 (42,6)	2,68 (7,6)	2.49
21	39	1,23 (1,7)	1,67 (38,0)	1,30 (7,4)	1.21
23	43	1,17 (1,7)	1,59 (38,3)	1,23 (7,0)	1.15

Tableau 7 : Comparaison entre le TOC₀ et HI₀ simulés avec 7 puits et ceux simulés avec 1 ou 2 puits

De plus, dès lors que l'on augmente le nombre de puits pris en compte dans la procédure d'inversion, la convergence vers les résultats de l'estimation utilisant l'ensemble des données accessible semble se faire rapidement (tableau 7).

Équation 14:
$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{nb_puits} (TOC_{0S_7 puits} - TOC_{0C_1 puits})^2}{nb_puits}}$$

1.2.6 Synthèse

La méthode inverse se base sur les travaux préalables de Chauveau *et al. (in prep.*) qui décrivent les équations permettant d'estimer les quantités de matière organique déposées et préservées dans un bassin sédimentaire. Elle permet d'inverser les paramètres de géochimie et de biologie sur la base des données de puits de forage. Elle vise à rendre cohérentes les approches d'estimation du potentiel pétrolier régional initial d'un bassin sédimentaire génétique et par bilan carbone. Elle fournit enfin une estimation régionale du potentiel pétrolier initial en accord avec le modèle géologique fourni par le modélisateur de bassin et contrainte aux données de puits de forage.

Les tests effectués sur la roche-mère de la formation Montney dans le bassin ouest canadien ainsi que les validations croisées montrent que la méthode est robuste et prédictive même avec un nombre réduit de données de contrainte du modèle. En comparaison des méthodes telles que celles développées par Mann et Zweigel (2008) ou Chauveau *et al. (in prep.*), l'approche proposée présente l'avantage de n'utiliser que les connaissances et les données nécessaires à la construction de modèles de bassin et elle fournit quasi instantanément les données d'entrée nécessaires à ces derniers. En revanche, elle ne permet pas de prendre en compte l'ensemble des processus des modèles plus sophistiqués (transport de la matière organique, apport de matière organique terrestre, production primaire variable en espace...).

Cette méthode est ainsi particulièrement intéressante pour l'étude de bassins frontières pour lesquels on dispose de données de forage dans les roches-mères peu nombreuses. Pour certains bassins, il arrive même que l'on ne dispose d'aucune donnée. La méthode peut tout de même fournir des cartes probabilisées de potentiel pétrolier initial dans ce genre de situation. Pour ce faire, on utilise uniquement les données de bathymétrie et de vitesse de sédimentation et on balaie l'ensemble des couples (PP_0 , Ox_0) physiquement acceptables (ex : méthode de Monte Carlo...). Par la suite l'obtention de données de puits permet de mieux contraindre les estimations et ainsi de réduire les incertitudes sur les prévisions.

La méthode présentée est proche de l'esprit de celle de Schwarzkopf (1993) mais en diffère dans le sens que cette dernière vise à étudier les incertitudes alors que notre approche est principalement une méthode inverse. Il est d'ailleurs à noter que la méthode se contente actuellement de sélectionner le couple (PP_{0} , Ox_{0}) qui permet de reproduire le mieux l'ensemble des données disponibles. Il est envisageable d'utiliser une optimisation bayésienne qui calcule une vraisemblance pour chacun de ces couples de valeurs et permette ainsi d'estimer l'incertitude sur la prévision du potentiel pétrolier dans le bassin.

Une perspective d'amélioration des estimations obtenues avec cette nouvelle méthode réside dans la prise en compte des variations régionales de productivité primaire. Pour conserver la philosophie de la méthode, la difficulté consistera alors à estimer cette variation régionale en fonction des connaissances, compétences et données accessibles aux modélisateurs de bassin. De même, afin d'aider le modélisateur de bassin dans des contextes plus variés, il faudrait être en mesure de faire le même type d'estimation pour les roches-mères terrestres telles que les charbons, les roches-mères lacustres et de prendre en compte les apports de matière organique terrestre dans les domaines océaniques.