



(22) **Date de dépôt/Filing Date:** 2014/06/17

(41) **Mise à la disp. pub./Open to Public Insp.:** 2014/12/20

(30) **Priorité/Priority:** 2013/06/20 (FR13 55 860)

(51) **Cl.Int./Int.Cl. G01V 9/00** (2006.01),
E21B 49/00 (2006.01)

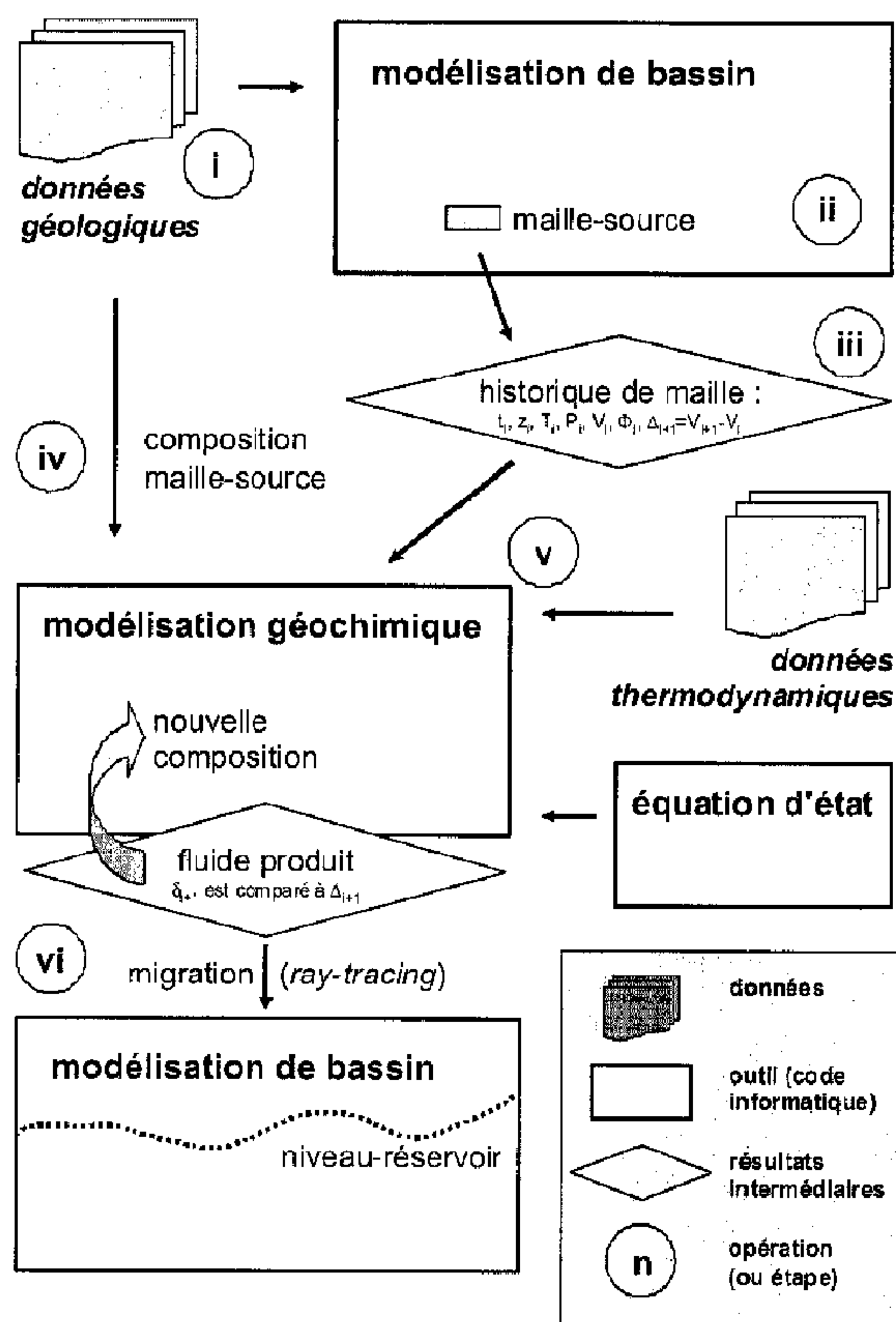
(71) **Demandeurs/Applicants:**
TOTAL SA, FR;
IFP ENERGIES NOUVELLES, FR

(72) **Inventeurs/Inventors:**
BROSSE, ETIENNE, FR;
RUDKIEWICZ, JEAN-LUC, FR;
PARRA, TEDDY, FR;
GUICHET, XAVIER, FR

(74) **Agent:** ROBIC

(54) **Titre : PROCÉDE POUR PREDIRE LA QUANTITE ET LA COMPOSITION DES FLUIDES PRODUITS PAR DES REACTIONS MINERALES OPERANT DANS UN BASSIN SEDIMENTAIRE**

(54) **Title: METHOD FOR PREDICTING THE QUANTITY AND COMPOSITION OF FLUIDS PRODUCED BY MINERAL REACTIONS OPERATING IN A SEDIMENTARY BASIN**



(57) **Abrégé/Abstract:**

- Procédé pour prédire la quantité et la composition des fluides produits par des réactions minérales opérant dans un bassin sédimentaire, et piégés avec les hydrocarbures dans les réservoirs. - On acquiert des données géologiques caractéristiques du

(57) Abrégé(suite)/Abstract(continued):

bassin et l'on construit une représentation du bassin par un maillage. Puis, on calcule, pour au moins un ensemble de mailles du maillage, et au moyen d'un modèle de bassin et des données géologiques, l'évolution des paramètres suivants : une profondeur d'enfouissement (z), une température (T), une pression de pore (P), un volume (V) et une porosité (Φ) à des âges successifs (t_i) représentatifs de l'histoire géologique du bassin. On détermine en chaque maille de l'ensemble de mailles, une composition minéralogique ou chimique de roche à partir des données géologiques du bassin. Enfin, on détermine la quantité et la composition de fluides d'origine minérale au sein de l'ensemble de mailles, au moyen d'un modèle géochimique et d'une équation d'état, à partir desdits paramètres, de ladite composition, et d'une base de données thermodynamiques.

ABRÉGÉ DESCRIPTIF

- Procédé pour prédire la quantité et la composition des fluides produits par des réactions minérales opérant dans un bassin sédimentaire, et piégés avec les hydrocarbures dans les réservoirs.
- On acquiert des données géologiques caractéristiques du bassin et l'on construit une représentation du bassin par un maillage. Puis, on calcule, pour au moins un ensemble de mailles du maillage, et au moyen d'un modèle de bassin et des données géologiques, l'évolution des paramètres suivants : une profondeur d'enfouissement (z), une température (T), une pression de pore (P), un volume (V) et une porosité (Φ) à des âges successifs (t_i) représentatifs de l'histoire géologique du bassin. On détermine en chaque maille de l'ensemble de mailles, une composition minéralogique ou chimique de roche à partir des données géologiques du bassin. Enfin, on détermine la quantité et la composition de fluides d'origine minérale au sein de l'ensemble de mailles, au moyen d'un modèle géochimique et d'une équation d'état, à partir desdits paramètres, de ladite composition, et d'une base de données thermodynamiques.

1

**PROCÉDÉ POUR PRÉDIRE LA QUANTITÉ ET LA COMPOSITION DES FLUIDES PRODUITS
PAR DES RÉACTIONS MINÉRALES OPÉRANT DANS UN BASSIN SÉDIMENTAIRE**

La présente invention concerne le domaine de l'industrie pétrolière, et plus particulièrement le domaine de l'exploration des hydrocarbures dans les bassins sédimentaires.

En particulier, l'invention concerne un procédé permettant de calculer la quantité et la composition des fluides d'origine minérale générés par les réactions qui surviennent entre les minéraux des roches sédimentaires à mesure qu'elles s'enfouissent au cours de l'histoire géologique d'un bassin. Ces fluides, caractérisés par des teneurs élevées en eau (H₂O) et/ou en dioxyde de carbone (CO₂), se forment typiquement au-dessus d'une température (T) de 250°C et d'une pression de pore (P) de 100 MPa, conditions qui sont atteintes dans les parties profondes de certains bassins.

Un enjeu majeur en exploration pétrolière et gazière est de repousser au maximum l'épuisement des ressources en hydrocarbures. Dans une telle perspective, des zones peu explorées compte tenu des coûts de forage associés aux conditions de température (T) et pression (P) élevées commencent à être considérées comme potentiellement économiques. Mais les hydrocarbures que l'on y rencontre, dominés par le méthane (CH₄) d'origine "thermogénique" (craquage de la matière organique), sont souvent mélangés à des gaz non hydrocarbures, typiquement CO₂ et/ou N₂, dans des proportions telles, que les gisements découverts se révèlent commercialement inexploitable.

Ainsi, être capable d'évaluer, avant le forage d'une zone d'un bassin sédimentaire, si dans celle-ci la composition des fluides accumulés dans les pièges peut avoir été fortement influencée par l'apport de fluides non hydrocarbures représente un intérêt considérable en exploration.

Présentation de l'art antérieur

Une approche visant à prédire le niveau d'un constituant volatil en fonction de la position dans le bassin sédimentaire, à partir de réactions minérales, a été présentée spécifiquement pour le CO₂ (L.M. Cathles & M. Schoell, 2007, "Modeling CO₂ generation, migration, and titration in sedimentary basins", *Geofluids* Vol.7, pp.441-450). Elle consiste à calculer la pression partielle de CO₂, pCO₂ (ou sa fugacité, fCO₂), à partir d'un ou plusieurs "tampons minéraux", c'est-à-dire d'un ou plusieurs assemblages de minéraux considérés comme présents dans le bassin, et en état d'équilibre. Ce faisant, il n'est pas possible d'évaluer le comportement d'une lithologie particulière. L'approche est au contraire globale, pour le bassin pris dans son ensemble. L'étude de tout nouveau bassin exige de pouvoir estimer, ou calibrer, la "capacité" de chaque tampon minéral retenu, c'est-à-dire l'importance

quantitative qui est en moyenne le sien dans les zones du bassin concerné qui sont productrices de CO₂.

À l'inverse, le procédé selon l'invention permet de calculer pas-à-pas le bilan de toutes les réactions minérales susceptibles de produire des constituants volatils au cours de l'histoire géologique d'un bassin, sous la seule contrainte de savoir attribuer des compositions aux roches considérées comme sources, et d'avoir accès au chemin (T,P) en fonction du temps.

Ainsi, l'objet de l'invention concerne un procédé pour prédire une quantité et une composition de fluides d'origine minérale générés dans un bassin sédimentaire par des réactions survenant entre des minéraux de roches sédimentaires à mesure que lesdites roches s'enfouissent au cours de l'histoire géologique dudit bassin.

L'invention fournit donc un outil pour évaluer la quantité de fluides pour l'essentiel non hydrocarbures (H₂O, CO₂, N₂, etc.) générés dans le bassin, et la part de ces fluides qui a pu ensuite migrer jusque dans des roches réservoirs, pour se mélanger aux hydrocarbures d'origine organique, notamment gazeux.

Elle représente une avancée très significative pour les géologues qui recherchent de nouvelles sources d'énergie fossile, en particulier dans les roches réservoirs profondes qui peuvent contenir d'abondantes ressources en gaz naturel.

20 **La méthode selon l'invention**

L'invention concerne un procédé pour prédire une quantité et une composition de fluides d'origine minérale générés dans un bassin sédimentaire par des réactions survenant entre des minéraux de roches sédimentaires à mesure que lesdites roches s'enfouissent au cours de l'histoire géologique dudit bassin, dans lequel :

- 25 i. on acquiert des données géologiques caractéristiques dudit bassin ;
- ii. on construit une représentation dudit bassin par un maillage ;
- iii. on calcule, pour au moins un ensemble de mailles dudit maillage, et au moyen d'un modèle de bassin et desdites données géologiques, l'évolution des paramètres suivants : une profondeur d'enfouissement (z), une température (T), une pression de pore (P), un volume (V) et une porosité (Φ) à des âges successifs t_i représentatifs de l'histoire géologique du bassin ;

- iv. on détermine en chaque maille dudit ensemble de mailles, une composition minéralogique ou chimique de roche à partir desdites données géologiques du bassin ;
- v. on détermine la quantité et la composition de fluides d'origine minérale au sein dudit ensemble de mailles, au moyen d'un modèle géochimique et à partir desdits paramètres et de ladite composition et d'une base de donnée thermodynamique.

Selon l'invention, après l'étape v. on peut déterminer une quantité desdits fluides ayant migré jusque dans des roches réservoirs, en déterminant des propriétés thermodynamiques desdits fluides, telles que la répartition en différentes phases fluides ou solides et/ou les densités et viscosités desdites phases, au moyen d'une équation d'état, et au moyen d'un modèle de migration en fonction desdites propriétés de fluides.

L'ensemble de mailles peut correspondre à des mailles sources, une maille source étant une maille dans laquelle la composition de la roche, la pression et la température sont propices à la formation de fluides d'origine minérale.

La température peut être supérieure à 250 °C et la pression est supérieure à 100 MPa.

A l'étape v, on peut réaliser les étapes suivantes :

- on détermine une suite de réactions qui, le long d'un chemin Température-Pression donné, fait passer une roche de composition chimique donnée par une succession de compositions minérales stables ;
- on détermine des variations de quantités de minéraux, ainsi que des quantités de constituants du fluide échangées, au cours de ladite suite de réactions.

On peut déterminer des variations de quantités de minéraux, ainsi que des quantités de constituants du fluide échangées, au cours de cette suite de réactions, au moyen des étapes suivantes :

- a. on identifie un système stable pour l'âge t_{i+1} à partir de la composition à un âge t_i ;
- b. on identifie des réactions minérales qui font passer du système stable pour l'âge t_i au système stable pour l'âge t_{i+1} ;
- c. on réalise un calcul du bilan quantitatif, en masse et/ou nombre de moles, des échanges opérés par ces réactions ;
- d. on réalise un calcul du bilan quantitatif, en volume, de ces mêmes échanges :
 - i. à partir d'une base de données thermodynamiques pour lesdits minéraux ;

- ii. à partir d'une l'équation d'état permettant de calculer la composition et la densité de chacune des phases du fluide ;
- e. on compare des variations de volume obtenues respectivement par modélisation géochimique δ_{i+1} et par modélisation de bassin Δ_{i+1} : si δ_{i+1} dépasse Δ_{i+1} d'une quantité jugée tolérable au regard de la précision attendue des bilans de fluide dans le modèle de bassin, telle que par exemple 1 % en valeur relative, on modifie la composition du système en lui ôtant un volume $\delta_{i+1} - \Delta_{i+1}$ de fluide, soit selon la composition du fluide total, soit selon celle de la phase la moins dense, soit encore selon celle d'un mélange de chacune des phases dans des proportions décidées en fonction des valeurs prises par une propriété calculée pour le fluide telle que la viscosité ;
- f. on met en mémoire la quantité et la composition du fluide soustrait du système pour fixer la nouvelle composition qu'il prend à l'âge t_{i+1} ;
- g. la nouvelle composition du système devient celle prise en compte pour la modélisation géochimique lors du passage à l'âge suivant ($t_{i+1} \rightarrow t_{i+2}$).

15 La variation de volume obtenue par modélisation géochimique peut s'écrire :

$$\delta_{i+1} = \{(V_m)_{i+1} + (V_f)_{i+1}\} - \{(V_m)_i + (V_f)_i\}, \text{ où } (V_f)_i \text{ et } (V_m)_i \text{ représentent respectivement le volume de fluide et le volume de minéraux pour l'âge } t_i ;$$

et la variation de volume obtenue par modélisation de bassin s'écrit :

$$\Delta_{i+1} = V_{i+1} - V_i, \text{ où } V_i \text{ représente le volume de maille obtenue par modélisation.}$$

20 Les fluides peuvent être caractérisés par des teneurs élevées en eau et/ou en dioxyde de carbone et/ou en gaz hydrocarbures et/ou en hydrogène et/ou en azote et/ou en hydrogène sulfuré.

Présentation sommaire des figures

- 25 - La figure 1 illustre la séquence opératoire pour la mise en œuvre du procédé selon l'invention.
- La figure 2 est une coupe verticale dans le modèle de bassin pris pour exemple, localisation d'une maille-source (MS) et d'un niveau réservoir (NR), trajet T-P-z- Φ reconstitué par le modèle pour la maille-source.
- 30 - La figure 3 illustre une évolution du système géochimique pris pour exemple : évolution en système fermé, permettant d'illustrer les réactions de genèse de CO₂ et de H₂O (dans cet exemple), et les variations de volume associées.

- La figure 4 illustre une évolution du système géochimique pris pour exemple : évolution de la maille-source entre les deux premières étapes de modélisation de bassin où l'ampleur des réactions minérales oblige à prendre en compte un système ouvert (22 et 25 Ma), et mise en évidence de l'effet produit par soustraction d'un "paquet" de fluide.
- 5 - La figure 5 représente des cartes des quantités cumulées de constituants expulsés (H₂O et CO₂, dans l'exemple traité), aux deux âges illustrés (22 et 25 Ma) (en kg·m⁻² d'unité géologique source).
- La figure 6 représente des blocs-diagrammes (à 22 et 25 Ma) illustrant le piégeage des constituants expulsés vers le niveau réservoir, *via* une procédure de migration par *ray-tracing*, et leur effet cumulatif, dans les pièges, à des hydrocarbures produits par ailleurs.

10

Description détaillée du procédé

La prédiction quantitative des fluides non hydrocarbures générés dans les bassins est possible à condition de résoudre une série de questions techniques.

15

Tout d'abord, il faut identifier, pour une composition donnée de roche, quelles réactions sont susceptibles de délivrer de tels fluides, dans quelles conditions de T et P elles se produisent, et quel est leur bilan.

20

Les minéraux constitutifs des roches sédimentaires sont hérités d'une suite de processus :

25

- l'altération continentale, qui produit en particulier des quantités importantes de minéraux argileux plus ou moins hydratés ;
- le transport jusqu'aux milieux de dépôt, qui s'accompagne de tris granulométriques mais aussi de mélanges, notamment avec des minéraux carbonatés provenant de divers organismes marins ;
- les modifications postérieures au dépôt, dites "diagénétiques", qui permettent à de nouveaux minéraux de précipiter au sein de la porosité, ou bien en remplacement d'autres minéraux qui se dissolvent.

30

De tous ces processus, souvent longs et complexes, résulte le spectre assez large des compositions minérales observées, par exemple dans les carottes récupérées en forage. Tant que les sédiments n'ont subi qu'un enfouissement (z) modéré, qui se traduit par des valeurs encore modestes de température (T) et pression (P) (typiquement, T inférieure à 100 ou 150°C, P inférieure à 20 ou 30 MPa), les minéraux détritiques dont la composition est

riche en eau (typiquement des argiles, par exemple des smectites à deux couches d'eau inter-foliaires) se maintiennent stables. Ensuite, et de manière de plus en plus marquée à mesure que les paramètres z , T et P augmentent, les assemblages minéraux ont tendance à se transformer en de nouveaux assemblages plus pauvres en H_2O (ou en groupements – OH). Il en va de même pour d'autres groupements d'atomes présents dans la structure cristalline des minéraux, et capables de se transformer en constituants volatils (comme CO_2 ou N_2) dès lors que des réactions peuvent faire passer d'un assemblage minéral à un autre plus stable.

Les réactions évoquées sont des processus géochimiques connus en sciences de la Terre, pour décrire la "dévolatilisation" dans le domaine du "métamorphisme" (P. Eskola, 1921, "The mineral facies of rocks", *Norsk Geologisk Tidsskrift* Vol.6, pp.142-194 ; N.L. Bowen, 1940, "Prograde metamorphism of siliceous limestone and dolomite, *Journal of Geology* Vol.48, pp.225-274).

Dans certains bassins, où le gradient géothermique et/ou l'épaisseur des dépôts sont grands, les conditions de température et pression atteintes dans les sédiments les plus enfouis sont telles (plus de $400^\circ C$, plus de 200 MPa) que des quantités importantes de constituants volatils peuvent être formées par ces réactions. La nature des assemblages minéraux en jeu, les réactions qui font passer de l'un à l'autre, et les conditions dans lesquelles ces réactions se produisent, peuvent être prédites à partir :

(1) d'une description suffisamment détaillée des propriétés thermodynamiques des minéraux existants, accessible aujourd'hui dans des bases de données dédiées (dont certaines sont publiées) ;

(2) d'un code informatique permettant, à partir de ces propriétés thermodynamiques et d'une composition de roche, de calculer quel est en toutes conditions l'assemblage le plus stable, et quelles quantités de matière sont échangées dans les réactions successives qui font progresser le système vers l'état le plus stable. On appelle "outil de modélisation géochimique" ce type de code. Il en existe de multiples, destinés à l'étude du métamorphisme.

La seconde question à résoudre concerne les variations de volume induites par les réactions. Les molécules libérées par les évolutions minérales ci-dessus (H_2O , CO_2 , N_2 , etc.) sont à l'état de fluide dans les conditions examinées. Les réactions modifient la composition minérale, celle du fluide, et par voie de conséquence les volumes de matière minérale et de fluide. Très généralement, le volume du fluide augmente. Comme la variation de volume de la roche (minéraux + fluide) est contrainte par l'évolution de la géométrie du bassin et par celle de la "compaction" (ou tassement) des sédiments, deux paramètres décrits par un outil

habituel de modélisation de bassin tel que le logiciel TemisFlow® (IFP Energies nouvelles, France), il est possible de calculer simplement, en fonction du progrès des réactions et dans l'hypothèse où l'influence des réactions sur la pression n'est pas prise en compte, la part du fluide qui peut rester en place dans le volume poreux, et la part qui devrait en être expulsée.

5 Une question complémentaire a trait à la nature et au comportement du fluide. Selon sa composition, et les valeurs de T et P, le mélange fluide est constitué d'une ou plusieurs phases. Dans le calcul d'une part expulsée du fluide, tel que présenté ci-dessus, il peut être souhaitable de traiter de manière différente chacune des phases, en fonction de la valeur prise par certaines de leurs caractéristiques respectives (densité, viscosité). La nature et le
10 comportement du fluide peuvent être prédits par la conjonction (1) d'une "équation d'état" (souvent, une équation cubique reliant pression, volume et température, et intégrée dans un code informatique), capable de calculer l'état des phases du fluide, leur composition et leur volume, donc leur densité ; (2) de modèles paramétrés capables de calculer d'autres grandeurs éventuellement requises, par exemple la viscosité.

15 La dernière question est relative à la migration du fluide expulsé. Dans la perspective du procédé qui fait l'objet de cette présentation, la migration est considérée à l'aide d'une procédure de *ray-tracing* déjà incluse dans la modélisation de bassin.

Le procédé selon l'invention consiste à combiner, selon une suite d'étapes cohérentes, les solutions qui peuvent être apportées à chacune de ces questions techniques.

20

La figure 1 illustre les étapes du procédé selon l'invention pour prédire la quantité et la composition de fluides d'origine minérale générés dans un bassin sédimentaire. Ce procédé comporte les étapes suivantes :

- i. Acquisition de données géologiques caractéristiques du bassin sédimentaire
- 25 ii. Construction d'une représentation du bassin par un maillage
- iii. Calcul de paramètres physiques (z , T , P , V , Φ) pour différents âges
- iv. Détermination de la composition minéralogique ou chimique des roches sources
- v. Détermination de la quantité et de la composition des fluides d'origine minérale, dans les roches sources
- 30 Et une étape optionnelle :
- vi. Migration des fluides d'origine minérale dans les réservoirs

Selon l'invention, un fluide d'origine minérale est caractérisé par des teneurs élevées en eau et/ou en dioxyde de carbone et/ou en gaz hydrocarbures et/ou en hydrogène et/ou en azote et/ou en hydrogène sulfuré.

5 i. Acquisition de données géologiques caractéristiques du bassin sédimentaire

Les données géologiques requises pour la modélisation de bassin sont en partie décrites dans le document suivant :

- 10 - J.L. Rudkiewicz et al., 2000, "Integrated basin modeling helps to decipher petroleum systems"; R. Melo and B.J. Katz, eds, "Petroleum systems of South Atlantic Margin", AAPG Memoir Vol. 73, pp.27-40.).

Il s'agit au moins des données suivantes :

- 15
- géométrie des couches à l'époque actuelle en une (z), deux (x,z) ou trois (x,y,z) dimensions,
 - nature des roches composant les couches,
 - âge géologique des couches,
 - températures, pressions, porosités observées dans les forages,
 - si nécessaire, épaisseurs sédimentaires érodées et âges d'érosion.

20 Ces données sont acquises par des moyens connus des spécialistes (diagraphies, carottes, ...).

ii. Construction d'une représentation du bassin par un maillage

La construction d'une représentation d'un bassin sédimentaire est une étape connue des spécialistes. Le maillage peut être en une (z), deux (x,z) ou trois (x,y,z) dimensions.

25

iii. Calcul de paramètres physiques (z, T, P, V, Φ) pour différents âges

30 Au cours de cette étape, on détermine l'évolution des paramètres suivants pour un ensemble de mailles du maillage : une profondeur d'enfouissement (z), une température (T), une pression de pore (P), un volume (V) et une porosité (Φ) à des âges successifs (t_i) représentatifs de l'histoire géologique du bassin.

Pour ce faire, on utilise un outil de modélisation de bassin, appelé "modèle de bassin", et les données géologiques acquises à l'étape i. Un modèle de bassin est un logiciel dédié à la modélisation de bassin sédimentaire, capable de calculer, en toute maille et pour tout temps géologique (t), les valeurs atteintes par la profondeur d'enfouissement (z), la température (T), la pression de pore (P), le volume (V) et la porosité (Φ). Remarque : V(z) et $\Phi(z)$ définissent ce qui est appelé "compaction". TemisFlow® (IFP Energies nouvelles, France) est un exemple de modèle de bassin.

A partir de ce logiciel, utilisé sur un ordinateur, on détermine donc des "historiques de maille", c'est-à-dire des tableaux $\{t_i, z_i, T_i, P_i, V_i, \Phi_i\}$ contenant la valeur de z, T, P, V et Φ d'une maille à des moments successifs t_i représentatifs de l'histoire géologique du bassin (épisodes de dépôt ou d'érosion des couches sédimentaires).

On peut limiter la reconstitution de ces historiques aux seules mailles qui sont considérées comme des sources potentielles de fluides d'origine minérale. Ces mailles sont appelées "mailles-sources". Une maille-source peut être définie comme une maille dans laquelle la composition de la roche, la pression et la température sont propices à la formation de fluides d'origine minérale, la pression et la température ayant atteint un certain seuil au cours de leur évolution géologique (par exemple, une température supérieure à 250 °C et une pression supérieure à 100 MPa).

iv. Détermination de la composition minéralogique ou chimique des roches sources

Au cours de cette étape, on détermine pour chaque maille-source la composition minéralogique (ou chimique) représentative, c'est-à-dire un ensemble de minéraux susceptibles de décrire d'une manière jugée comme suffisamment représentative et complète la composition des roches du bassin dans cette maille.

Cette composition minéralogique (ou chimique) est inférée des données géologiques du bassin acquises à l'étape initiale. Elle peut être déterminée de manière directe par analyse minéralogique des déblais remontés lors du forage d'un ou plusieurs puits, ou par l'examen minéralogique des carottes de roches prélevées lors de tels sondages. Elle peut aussi être déterminée de manière indirecte, par l'analyse des diagraphies électriques enregistrées le long des puits. Une autre méthode consiste à utiliser les mesures géophysiques indirectes (sismique réflexion, magnétométrie ou gravimétrie) qui renseignent sur les grandes classes de composition. Enfin, une dernière méthode consiste à rechercher des ensembles lithologiques qui se présentent comme des équivalents latéraux des couches d'intérêt et qui affleurent à proximité.

v. Détermination de la quantité et de la composition des fluides d'origine minérale, dans les roches sources

5 Au cours de cette étape, on détermine au sein de l'ensemble de mailles-sources la quantité et la composition des fluides d'origine minérale. Pour ce faire, on utilise :

- un modèle géochimique ;
- les paramètres z , T , P , V et Φ ;
- la composition minéralogique ou chimique des roches sources ;
- une base de donnée thermodynamique contenant, pour un ensemble de minéraux susceptibles de décrire la composition des roches du bassin, les paramètres thermodynamiques permettant de connaître et / ou de calculer en toutes conditions de température et pression, c'est-à-dire l'enthalpie libre de Gibbs de chaque minéral et le volume molaire de chaque minéral.

15 Un modèle géochimique (Theriak/Domino par exemple) est un logiciel capable de calculer en toutes conditions de température et pression, et à partir de la base de donnée thermodynamique :

- la composition minérale stable d'une roche de composition chimique donnée ;
- la suite des réactions qui, le long d'un chemin T-P donné, fait passer la roche par une succession de compositions stables ;
- 20 - les quantités de minéraux et de constituants du fluide échangées au cours de cette suite de réactions.

Ainsi, cette étape v. comporte les sous-étapes suivantes :

- on détermine une suite de réactions qui, le long d'un chemin Température-Pression donné, fait passer une roche de composition chimique donnée par une succession de compositions minérales stables ;
- on détermine des variations de quantités de minéraux, ainsi que des quantités de constituants du fluide échangées, au cours de ladite suite de réactions.

Pour ce faire, on réalise les itérations suivantes pour chaque maille-source :

- 30 a. on identifie un système (assemblage minéral + fluide) stable pour l'âge t_{i+1} (conditions T_{i+1} , P_{i+1}) à partir de la composition à un âge t_i ;

- b. on identifie des réactions minérales qui font passer du système stable pour l'âge t_i au système stable pour l'âge t_{i+1} ;
- c. on réalise un calcul du bilan quantitatif, en masse et/ou nombre de moles, des échanges opérés par ces réactions (*i.e.*, minéraux créés ou détruits, constituants du fluide créés ou détruits) ;
- d. on réalise un calcul du bilan quantitatif, en volume, de ces mêmes échanges :
 - à partir d'une base de données thermodynamiques pour lesdits minéraux ;
 - à partir d'une l'équation d'état permettant de calculer la composition et la densité de chacune des phases du fluide ; un exemple d'équation d'état est donné dans le document suivant :
 - Z. Duan, N. Moller & J.H. Weare, 1992, "An equation of state (EOS) for CH₄-CO₂-H₂O system: I. Pure systems from 0 to 1000°C and 0 to 8000 bar", *Geochimica Cosmochimica Acta* Vol.56, pp.2605-2617.
- e. on compare des variations de volume obtenues respectivement par modélisation géochimique δ_{i+1} et par modélisation de bassin (modélisation de la compaction) Δ_{i+1} : si δ_{i+1} dépasse Δ_{i+1} d'une quantité jugée tolérable au regard de la précision attendue des bilans de fluide dans le modèle de bassin, telle que par exemple 1 % en valeur relative, on modifie la composition du système en lui ôtant un volume $\delta_{i+1} - \Delta_{i+1}$ de fluide, soit selon la composition du fluide total, soit selon celle de la phase la moins dense, soit encore selon celle d'un mélange de chacune des phases dans des proportions décidées en fonction des valeurs prises par une propriété calculée pour le fluide telle que la viscosité ;
- f. on met en mémoire la quantité et la composition du fluide soustrait du système pour fixer la nouvelle composition qu'il prend à l'âge t_{i+1} ;
- g. la nouvelle composition du système devient celle prise en compte pour la modélisation géochimique lors du passage à l'âge suivant ($t_{i+1} \rightarrow t_{i+2}$).

La variation de volume obtenue par modélisation géochimique peut s'écrire, dans la maille-source :

$$\delta_{i+1} = \{(V_m)_{i+1} + (V_f)_{i+1}\} - \{(V_m)_i + (V_f)_i\}$$

où $(V_f)_i$ et $(V_m)_i$ représentent respectivement le volume de fluide et le volume de minéraux pour l'âge t_i .

La variation de volume obtenue par modélisation de bassin s'écrit :

$$\Delta_{i+1} = V_{i+1} - V_i$$

où V_i représente le volume de la maille-source, obtenu par modélisation de bassin.

5 vi. Migration des fluides d'origine minérale dans les réservoirs

On détermine la quantité des fluides ayant migré jusque dans des roches réservoirs. Pour ce faire, on détermine les propriétés du fluide (état des phases, composition et densité de chacune des phases) au moyen d'une équation d'état, utilisable dès lors que la température, la pression et la composition globale du fluide sont connus.

10 Enfin, on utilise ces propriétés au sein d'un modèle de migration. Une procédure de ray-tracing est une des options possibles pour le calcul de la migration. Ce type de procédure est disponible dans l'outil de modélisation de bassin (TemisFlow® (IFP Energies nouvelles, France) par exemple).

15 Cette procédure est appliquée à l'âge t_{i+1} , en considérant que les masses de fluide soustraites aux mailles-sources, obtenues pour l'itération en temps $t_i \rightarrow t_{i+1}$ au cours de l'opération (v) décrite ci-dessus (Détermination de la quantité et de la composition des fluides d'origine minérale, dans les roches sources), sont collectées instantanément dans un "niveau-réservoir" (éventuellement plusieurs), défini(s) au préalable dans les données géologiques.

20 Le cas échéant, ils y rejoignent des fluides hydrocarbures provenant des "roches-mères" classiquement prises en compte par un modèle de bassin. La géométrie du niveau-réservoir donné, à l'âge t_{i+1} , détermine en son sein l'existence de "pièges" pour les fluides.

25 Par une nouvelle utilisation de l'équation d'état, la composition et la densité de la (ou des) phase(s) fluide(s) sont calculées dans les conditions de température (T_{i+1}) et de pression (P_{i+1}) de chaque piège à l'âge t_{i+1} .

La répartition des fluides dans les pièges est effectuée en fonction de ces propriétés et du volume disponible dans chaque piège. Si plusieurs niveaux-réservoirs sont définis, une règle de répartition des fluides profonds collectés, entre les divers niveaux, est également définie.

30

Exemple

Les figures 2 à 6 illustrent un exemple d'application du procédé selon l'invention. Les caractéristiques géologiques selon cet exemple sont les suivantes :

- Paramètres liés au bassin sédimentaire

La figure 2 montre une coupe géologique à travers la représentation de bassin choisie (maillage 3D) et l'histoire d'une maille-source située dans la couche la plus profonde (déposée entre 43 et 42 Ma).

5 Pour la maille-source, on utilise le modèle de bassin pour calculer l'évolution de la profondeur (toit de la maille), de la température, de la pression, et de la porosité tout au long des 19 étapes de l'histoire géologique, c'est-à-dire dans les intervalles compris entre les 20 âges de la description temporelle du bassin (43, 42, 41, 40, 37, 35, 32, 30, 27, 25, 22, 21, 20, 18, 12, 10, 7, 5 et 2 Ma avant 0 Ma), comme celle du volume de la maille (non représenté).

10

- Composition minéralogique de la maille-source : grès contenant des carbonates diagénétiques, exprimée avec les éléments chimiques Si, Al, Ca, Mg, C, H et O (ni Na, ni K, ni Fe) :

15 ○ proportions en volume, définies à 100°C et 32.5 MPa : 60 % de quartz, 5 % de kaolinite, 15 % de calcite, 10 % de dolomite, porosité Φ de 10 % occupée par un fluide constitué à 90 % de H₂O et 10 % de CO₂ ;

20 ○ composition élémentaire correspondante, en nombre de moles pour 1 dm³ de roche (roche = minéraux + fluide présent dans la porosité) : 27,451 mol de Si (silicium), 1,005 mol de Al (aluminium), 5,615 mol de Ca (calcium), 1,554 mol de Mg (magnésium), 7,724 mol de C (carbone), 12 mol de H (hydrogène), 85,026 mol de O (oxygène).

20

- Niveau-réservoir de collecte des fluides pour la procédure de *ray-tracing* : couche déposée entre 40 et 37 Ma (figure 2).

- Structuration du bassin : elle est illustrée par le bloc-diagramme de la figure 6.

25

Les outils logiciels utilisés dans cet exemple sont les suivants :

1. Logiciel pour la modélisation de bassin (modèle de bassin) : TemisFlow® (IFP Energies nouvelles, France). D'autres modèles de bassin pourraient être utilisés dans le même but.

30 2. Base de données thermodynamiques : elle est construite sur la base des données issues des références suivantes :

- R.G. Berman : 1988, "Internally-consistent thermodynamic data for minerals in the system $\text{Na}_2\text{O}-\text{K}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{MgO}-\text{FeO}-\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{TiO}_2-\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2$ ", *Journal of Petrology* Vol.29, pp.485-522
- 5 - O. Vidal, T. Parra & F. Trotet, 2001, "A thermodynamic model for Fe-Mg aluminous chlorite using data from phase equilibrium experiments and natural pelitic assemblages in the 100°-600°C, 1-25 kb range", *American Journal of Science* Vol.301, pp.557-592 ;
- 10 - T. Parra, O. Vidal & P. Agard, 2002, "A thermodynamic model for Fe-Mg dioctahedral K-white micas using data from phase equilibrium experiments and natural pelitic assemblages", *Contribution to Mineralogy and Petrology* Vol.143, pp.706-732 ;
- O. Vidal, T. Parra & P. Vieillard, 2005, "Thermodynamic properties of the Tschermak solid solution in Fe-chlorites: Application to natural examples and possible role of oxidation", *American Mineralogist* Vol.90, pp.359-370 ;
- 15 - O. Vidal, V. De Andrade, E. Lewin, M. Munoz, T. Parra & S. Pascarelli, 2006, "P-T-deformation- $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ mapping at the thin section scale and comparison with XANES mapping. Application to a garnet-bearing metapelite from the Sambagawa metamorphic belt (Japan)", *Journal of Metamorphic Geology* Vol.24, pp.669-683).

20 D'autres bases de données pourraient être utilisées dans le même but, par exemple celle de T.J.B. Holland & R. Powell (2011, "An improved and extended internally consistent thermodynamic dataset for phases of petrological interest, involving a new equation of state for solids", *Journal of Metamorphic Geology* Vol.29, pp.333-383).

25 3. Code informatique pour la modélisation géochimique (modèle géochimique) : la suite *Theriak/Domino* a été utilisée. Cette suite est décrite dans les références suivantes :

- C. de Capitani & T.H. Brown, 1987, "The computation of chemical equilibrium in complex systems containing non-ideal solutions", *Geochimica Cosmochimica Acta* Vol.51, pp.2639-2652 ;
- 30 - C. de Capitani & K. Petrakakis K., 2010, "The computation of equilibrium assemblage diagrams with Theriak/Domino software", *American Mineralogist* Vol.95, pp.1006-1016).

D'autres codes informatiques pourraient être utilisés dans le même but, par exemple *Perple_X* (J.A.D. Connolly, 2005, "Computation of phase equilibria by linear programming: A tool for geodynamic modeling and its application to subduction zone

decarbonation", *Earth & Planetary Science Letters* Vol.236, pp.524-541), ou encore *THERMOCALC* (R. Powell, T.J.B. Holland & B. Worley, 1998, "Calculating phase diagrams involving solid solutions via non-linear equations, with examples using *THERMOCALC*", *Journal of Metamorphic Geology* Vol.16, pp.577-588).

- 5 4. Équation d'état de Z. Duan, N. Moller & J.H. Weare décrite dans :
- 1992, "An equation of state (EOS) for CH₄-CO₂-H₂O system: I. Pure systems from 0 to 1000°C and 0 to 8000 bar", *Geochimica Cosmochimica Acta* Vol.56, pp.2605-2617 ;
 - 10 - 1992, "An equation of state (EOS) for CH₄-CO₂-H₂O system: II. Mixtures from 50 to 1000°C and 0 to 1000 bar", *Geochimica Cosmochimica Acta* Vol.56, pp.2619-2631).

D'autres équations d'état pourraient être utilisées dans le même but.

15 La modélisation géochimique en système fermé, c'est-à-dire sans soustraction de fluide, permet de faire comprendre une évolution-type des compositions et des volumes le long du "chemin {t_i, T_i, P_i}" (chemin parcouru à T et P croissants), pour le système chimique représentant la maille-source n°1 (figure 3) :

- 20 • événement-type A : traduit l'effet d'une réaction uni-variante productrice de fluide et conduisant à une variation brutale des compositions et des volumes (réaction A : dolomite + kaolinite + H₂O → [chlorites] + quartz + calcite + CO₂ complète jusqu'à épuisement de la kaolinite) (la notation [chlorites] représente la "solution solide" des chlorites) ;
- 25 • épisode-type B : traduit l'effet d'une réaction di-variante au cours de laquelle la solution solide des chlorites change peu à peu de composition (dolomite + quartz + [chlorites 1] + H₂O → [chlorites 2] + calcite + CO₂ jusqu'à épuisement de la dolomite) ;
- variation du volume total $\{(V_m)_i + (V_f)_i\}$ (figure 3d) : faible et négligeable avant l'événement A ; positive lors de l'événement A ; positive et progressive durant l'épisode B.

30 L'événement A survient entre les temps "27 Ma" et "25 Ma" de la modélisation de bassin. Il induit la sortie d'un "paquet" de fluide à l'âge "25 Ma". L'épisode B se déroule progressivement entre les âges "25 Ma" et "22 Ma". Il se poursuit un peu au-delà, mais dès l'âge "22 Ma" on peut tenir compte du fluide qu'il produit pour la migration. Les âges "25 Ma"

et "22 Ma" permettent d'illustrer, ici, la procédure d'ouverture du système source et de modification de la composition de la maille-source qui lui est attachée, puis celle de la migration du fluide vers un niveau réservoir sus-jacent à la source.

- 5 La mise en œuvre du procédé peut donc être illustrée de la manière suivante en utilisant cet exemple :
1. Modélisation de bassin : reconstitution de l'historique $\{t_i, z_i, T_i, P_i, V_i, \Phi_i\}$ d'une maille-source (figure 2).
 2. Modélisation géochimique et utilisation de l'équation d'état, étape par étape, pour chaque maille-source. Par exemple, entre les temps "43 Ma" et "25 Ma", pour le système chimique représentant la maille-source :
 - 10 a. cas où, à chaque âge t_{i+1} , la variation du volume total $\delta_{i+1}-\Delta_{i+1}$ reste dans la tolérance définie pour que le système source demeure fermé (comme à la figure 3 avant l'événement A) : la composition du système n'est pas modifiée pour le calcul géochimique à l'étape suivante ;
 - 15 b. cas où la variation du volume total $\delta_{i+1}-\Delta_{i+1}$ nécessite qu'une partie du fluide soit extraite du système source, comme à l'âge "25 Ma" (figure 3, après l'événement A) et à l'âge "22 Ma" (figure 3, au cours de l'épisode B) :
 - 20 i. l'équation d'état donne la composition de chaque phase fluide à l'âge "25 Ma" (figure 4a) ;
 - ii. une règle de séparation est appliquée : ici, on choisit de retirer les phases fluides l'une après l'autre, par ordre de densité croissante, ce qui conduit à retirer tout le volume de la "phase CO₂" formée (soit environ 5 % du volume total de la roche), ou encore H₂O et CO₂ en proportion molaire de leur contribution à cette phase (respectivement 56 % et 44 %) ;
 - 25 iii. la composition du système est modifiée pour le calcul géochimique entre l'âge "25 Ma" et l'âge "22 Ma" (figure 4b) : il ne se reforme pas de phase CO₂, mais à 22 Ma il convient de retirer 17 % de la "phase H₂O", qui contient respectivement 85 % de H₂O, et 15 % de CO₂ en proportion molaire (on poursuivrait alors par un nouveau changement de composition pour la reprise du calcul géochimique, jusqu'à l'âge "21 Ma" –cela n'est pas illustré ici).
 - 30
 3. Modélisation de bassin : pour le calcul de migration par la procédure de *ray-tracing*. À une étape donnée, on procède en collectant les fluides d'un ensemble de mailles-

sources (fluides inorganiques, et, éventuellement, hydrocarbures en provenance de roches-mères identifiées par ailleurs). Ici, dans un seul niveau-réservoir.

- 5 a. La première étape où la migration est illustrée se termine à "25 Ma" : un ensemble de mailles-sources est concerné, pour lequel on montre les quantités de H₂O et de CO₂ qui doivent être expulsées (figure 5, en bas).
- 10 b. La migration par *ray-tracing*, à 25 Ma, de H₂O et de CO₂ produits dans les mailles-sources est combinée à celle de CH₄ produit dans des roches-mères : l'application de l'équation d'état au sein de chaque piège structural déterminé par la géométrie du bassin à 25 Ma conduit à la répartition des fluides qui est présentée figure 6a. On y voit une phase riche en CO₂, la plus légère, occupant la partie élevée des pièges, et une phase "hydrocarbures" (produits dans des roches-mères par ailleurs), relativement plus dense. L'eau forme la troisième phase et occupe la base de l'espace poreux disponible dans la structure du piège, au sein de la roche réservoir.
- 15 c. La seconde étape où la migration est illustrée se termine à "22 Ma" : la figure 5 (en haut) montre, pour cet âge, les quantités cumulées de H₂O et de CO₂ expulsées depuis 25 Ma.
- 20 d. De la même façon, la migration par *ray-tracing* à 22 Ma conduit à la répartition des fluides qui est présentée figure 6b. Les fluides présents à 25 Ma s'ajoutent à ceux expulsés entre 25 et 22 Ma, et fournissent une nouvelle répartition des phases à 22 Ma. On note que les pièges disponibles à 22 Ma ne sont pas exactement les mêmes que ceux disponibles à 25 Ma.

REVENDEICATIONS

1. Procédé pour prédire une quantité et une composition de fluides d'origine minérale
5 de roches sédimentaires à mesure que lesdites roches s'enfouissent au cours de
l'histoire géologique dudit bassin, dans lequel :
 - i. on acquiert des données géologiques caractéristiques dudit bassin ;
 - ii. on construit une représentation dudit bassin par un maillage ;
 - 10 iii. on calcule, pour au moins un ensemble de mailles dudit maillage, et au moyen d'un
modèle de bassin et desdites données géologiques, l'évolution des paramètres
suivants : une profondeur d'enfouissement (z), une température (T), une pression
de pore (P), un volume (V) et une porosité (Φ) à des âges successifs ti représentatifs
de l'histoire géologique du bassin ;
 - 15 iv. on détermine en chaque maille dudit ensemble de mailles, une composition
minéralogique ou chimique de roche à partir desdites données géologiques du
bassin ;
 - v. on détermine une quantité et une composition de fluides d'origine minérale au sein
20 dudit ensemble de mailles, au moyen d'un modèle géochimique et à partir desdits
paramètres et de ladite composition minéralogique ou chimique de roche et d'une
base de donnée thermodynamique.
2. Procédé selon la revendication 1, dans lequel après l'étape v. on détermine une quantité
desdits fluides ayant migré jusque dans des roches réservoirs, en déterminant des
propriétés thermodynamiques desdits fluides, telles que la répartition en différentes
25 phases fluides ou solides et/ou les densités et viscosités desdites phases, au moyen
d'une équation d'état, et au moyen d'un modèle de migration en fonction desdites
propriétés de fluides.
3. Procédé selon l'une des revendications précédentes, dans lequel ledit ensemble de
mailles correspond à des mailles sources, une maille source étant une maille dans
laquelle la composition de la roche, la pression et la température sont propices à la
30 formation de fluides d'origine minérale.
4. Procédé selon la revendication 3, dans lequel la température est supérieure à 250 °C et
la pression est supérieure à 100 MPa.

5. Procédé selon l'une des revendications précédentes, dans lequel à l'étape v. on réalise les étapes suivantes :
- on détermine une suite de réactions qui, le long d'un chemin Température-Pression donné, fait passer une roche de composition chimique donnée par une succession de compositions minérales stables ;
 - on détermine des variations de quantités de minéraux, ainsi que des quantités de constituants du fluide échangées, au cours de ladite suite de réactions.
6. Procédé selon la revendication 5, dans lequel on détermine des variations de quantités de minéraux, ainsi que des quantités de constituants du fluide échangées, au cours de cette suite de réactions, au moyen des étapes suivantes :
- a. on identifie un système stable pour l'âge t_{i+1} à partir de la composition à un âge t_i ;
 - b. on identifie des réactions minérales qui font passer du système stable pour l'âge t_i au système stable pour l'âge t_{i+1} ;
 - c. on réalise un calcul du bilan quantitatif, en masse et/ou nombre de moles, des échanges opérés par ces réactions ;
 - d. on réalise un calcul du bilan quantitatif, en volume, de ces mêmes échanges :
 - iii. à partir d'une base de données thermodynamiques pour lesdits minéraux ;
 - iv. à partir d'une l'équation d'état permettant de calculer la composition et la densité de chacune des phases du fluide ;
 - e. on compare des variations de volume obtenues respectivement par modélisation géochimique δ_{i+1} et par modélisation de bassin Δ_{i+1} : si δ_{i+1} dépasse Δ_{i+1} d'une quantité jugée tolérable au regard de la précision attendue des bilans de fluide dans le modèle de bassin, telle que par exemple 1 % en valeur relative, on modifie la composition du système en lui ôtant un volume $\delta_{i+1} - \Delta_{i+1}$ de fluide, soit selon la composition du fluide total, soit selon celle de la phase la moins dense, soit encore selon celle d'un mélange de chacune des phases dans des proportions décidées en fonction des valeurs prises par une propriété calculée pour le fluide telle que la viscosité ;
 - f. on met en mémoire la quantité et la composition du fluide soustrait du système pour fixer la nouvelle composition qu'il prend à l'âge t_{i+1} ;
 - g. la nouvelle composition du système devient celle prise en compte pour la modélisation géochimique lors du passage à l'âge suivant ($t_{i+1} \rightarrow t_{i+2}$).
7. Procédé selon la revendication 6, dans lequel la variation de volume obtenue par modélisation géochimique s'écrit :

$\delta_{i+1} = \{(V_m)_{i+1} + (V_f)_{i+1}\} - \{(V_m)_i + (V_f)_i\}$, où $(V_f)_i$ et $(V_m)_i$ représentent respectivement le volume de fluide et le volume de minéraux pour l'âge t_i ;

et la variation de volume obtenue par modélisation de bassin s'écrit :

$\Delta_{i+1} = V_{i+1} - V_i$, où V_i représente le volume de maille obtenue par modélisation.

- 5 8. Procédé selon l'une des revendications précédentes, dans lequel les fluides sont caractérisés par des teneurs élevées en eau et/ou en dioxyde de carbone et/ou en gaz hydrocarbures et/ou en hydrogène et/ou en azote et/ou en hydrogène sulfuré.

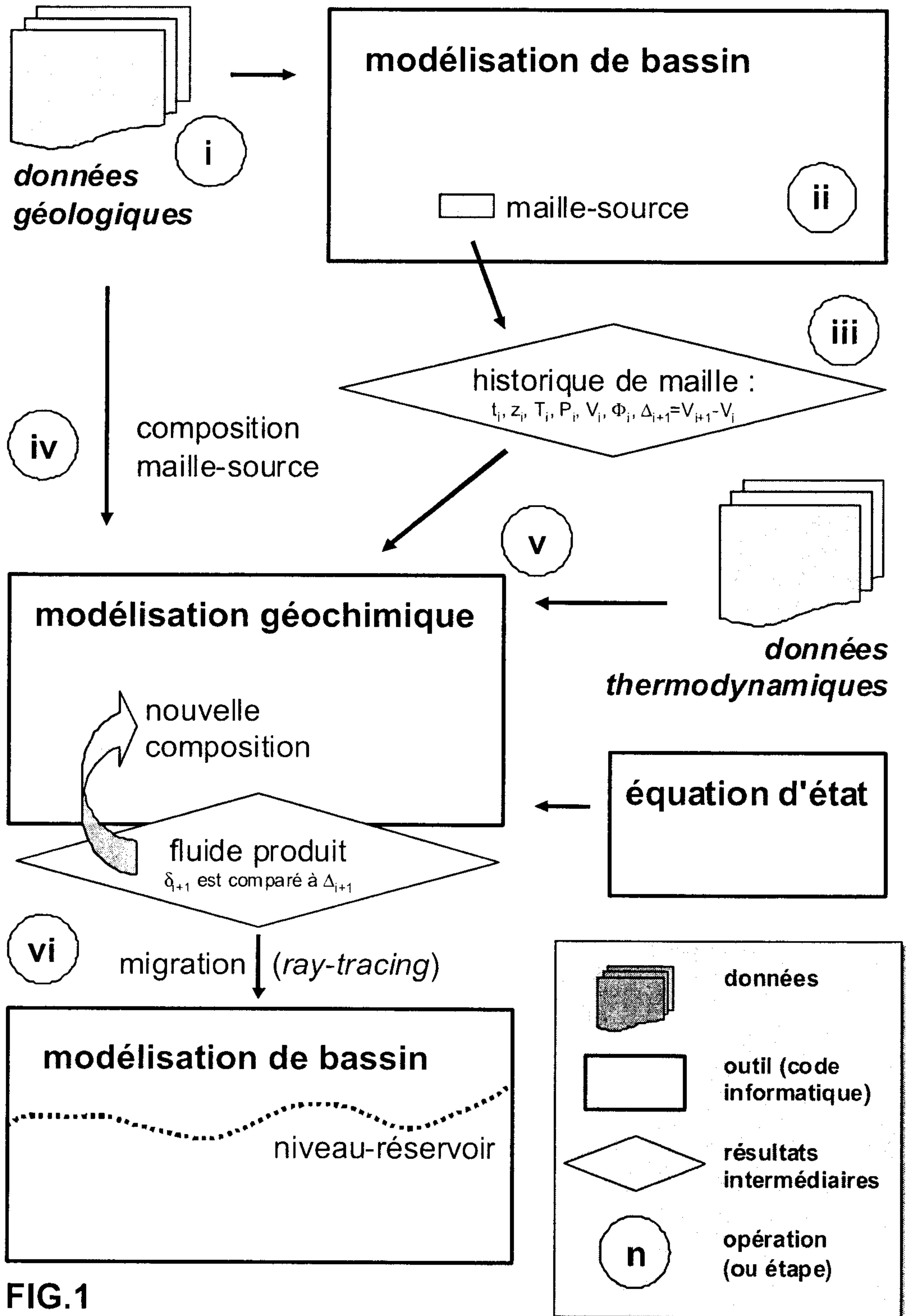


FIG.1

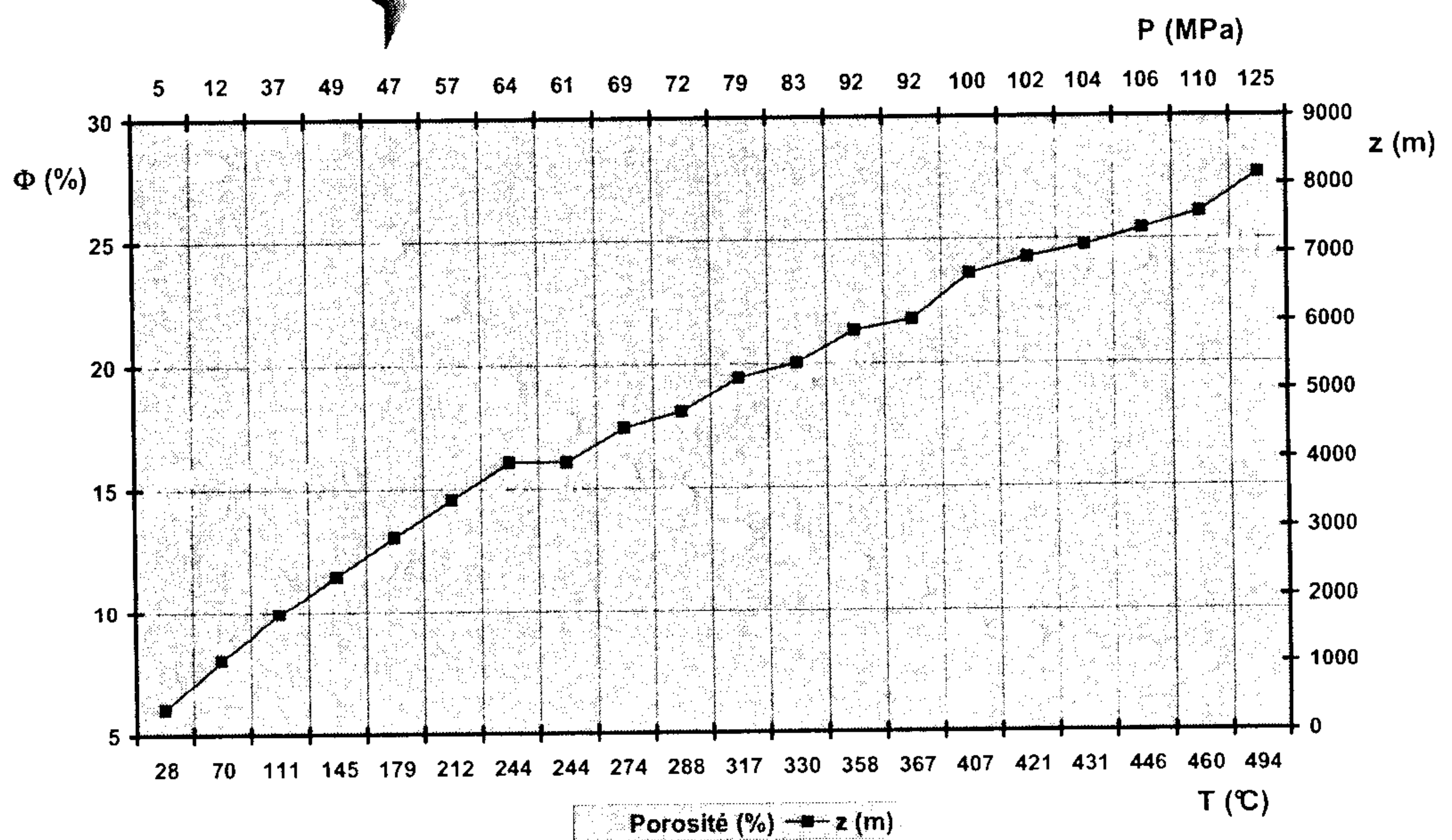
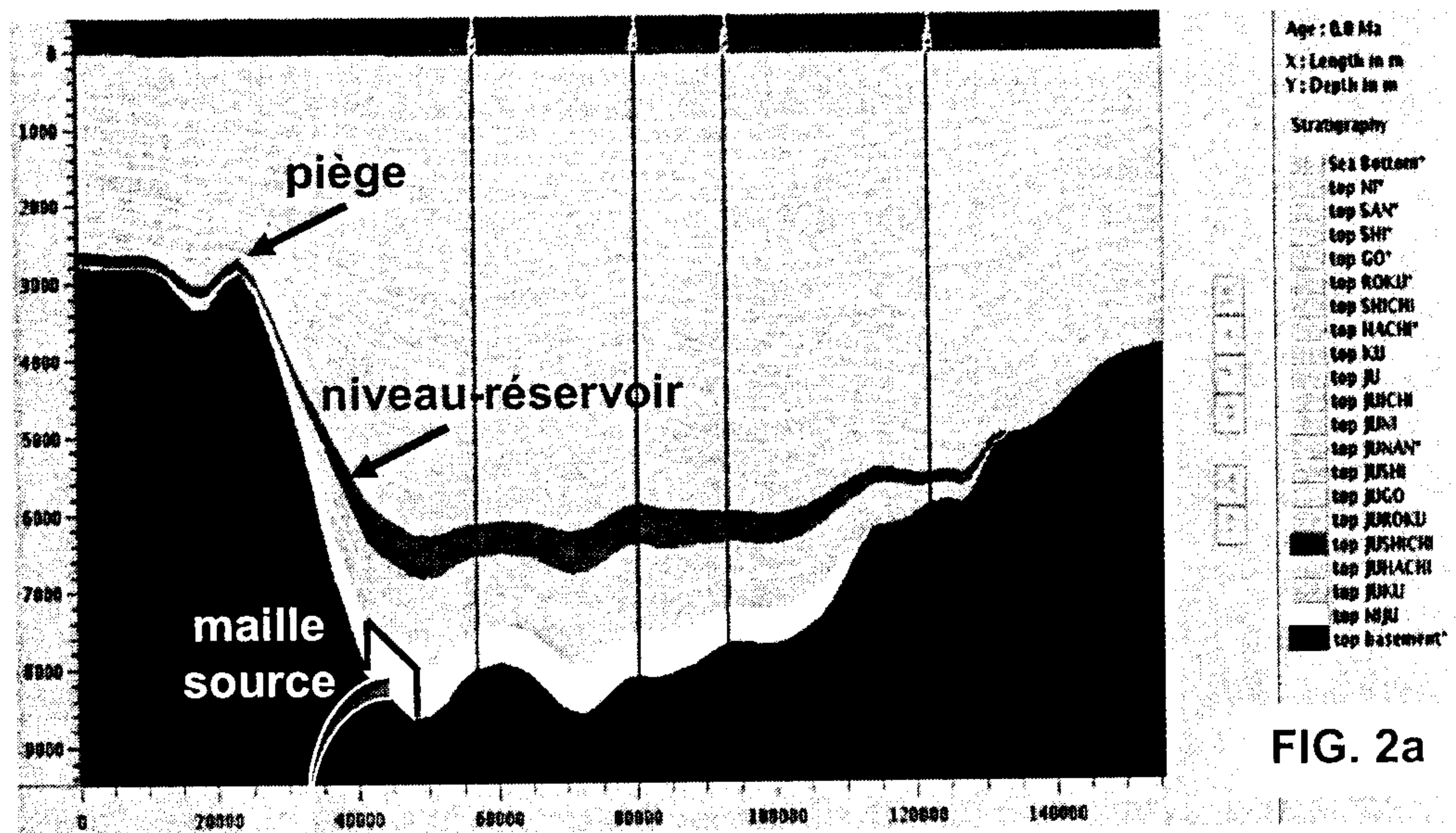
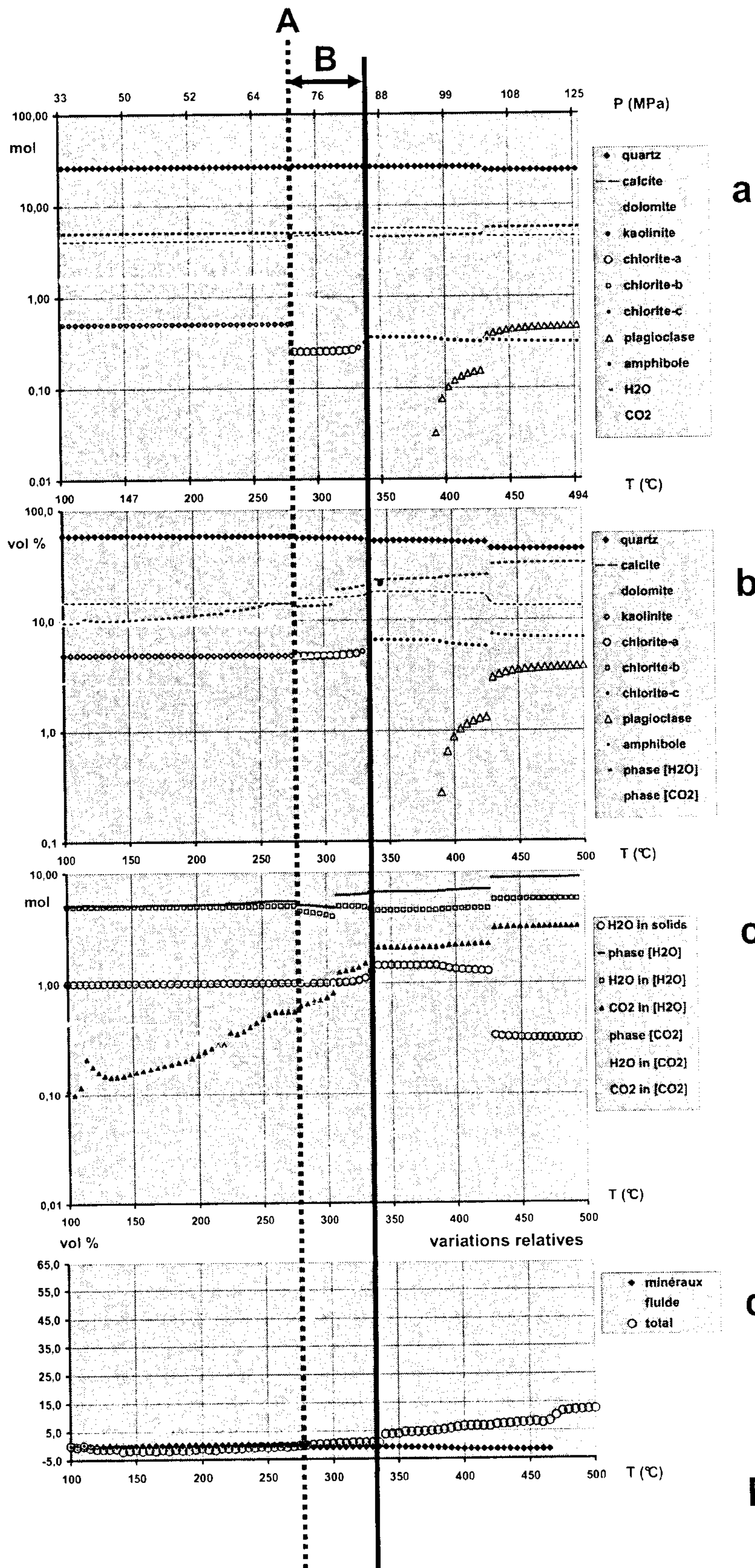


FIG. 2b



a

b

c

d

FIG.3

4/6

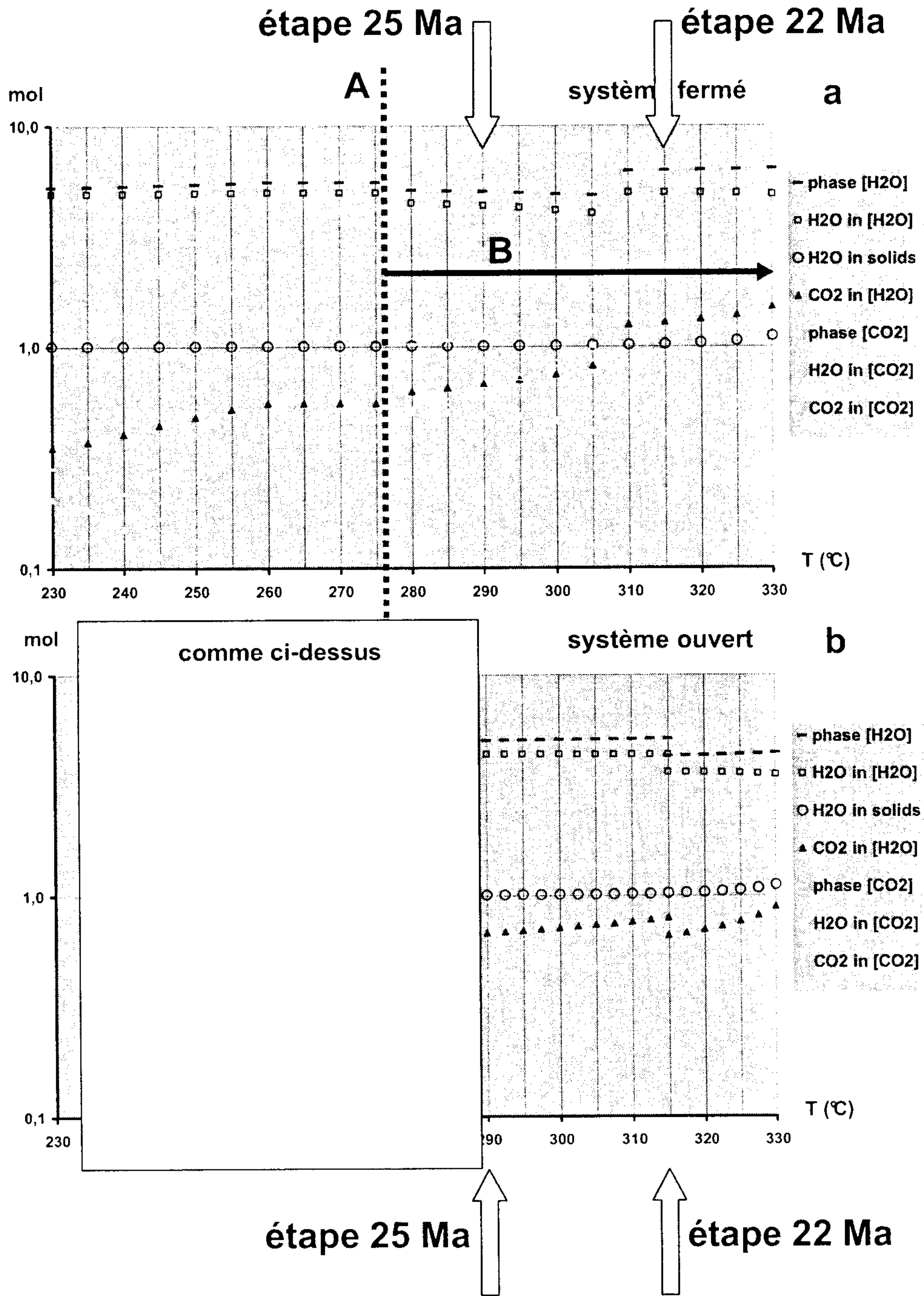


FIG.4

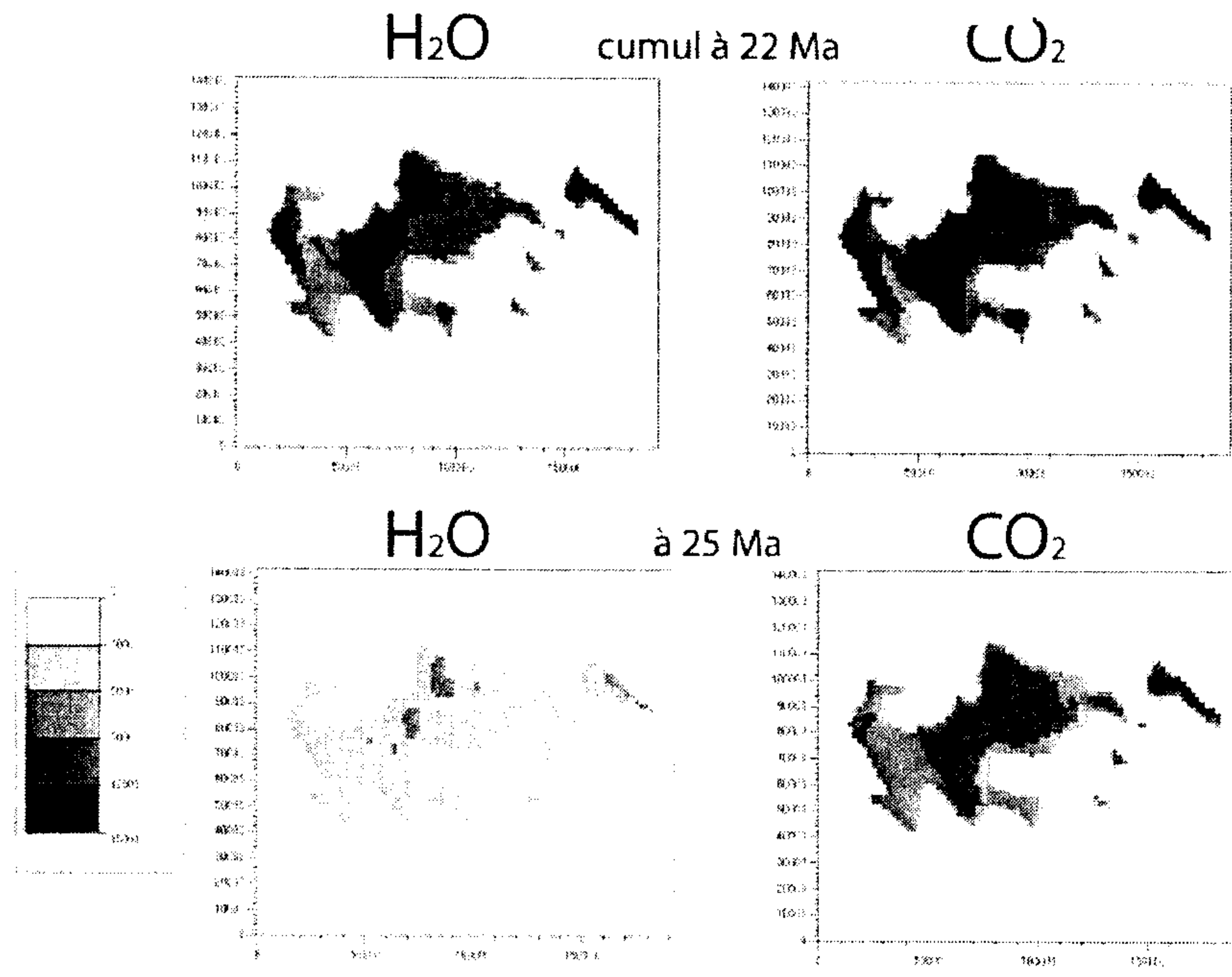


FIG.5

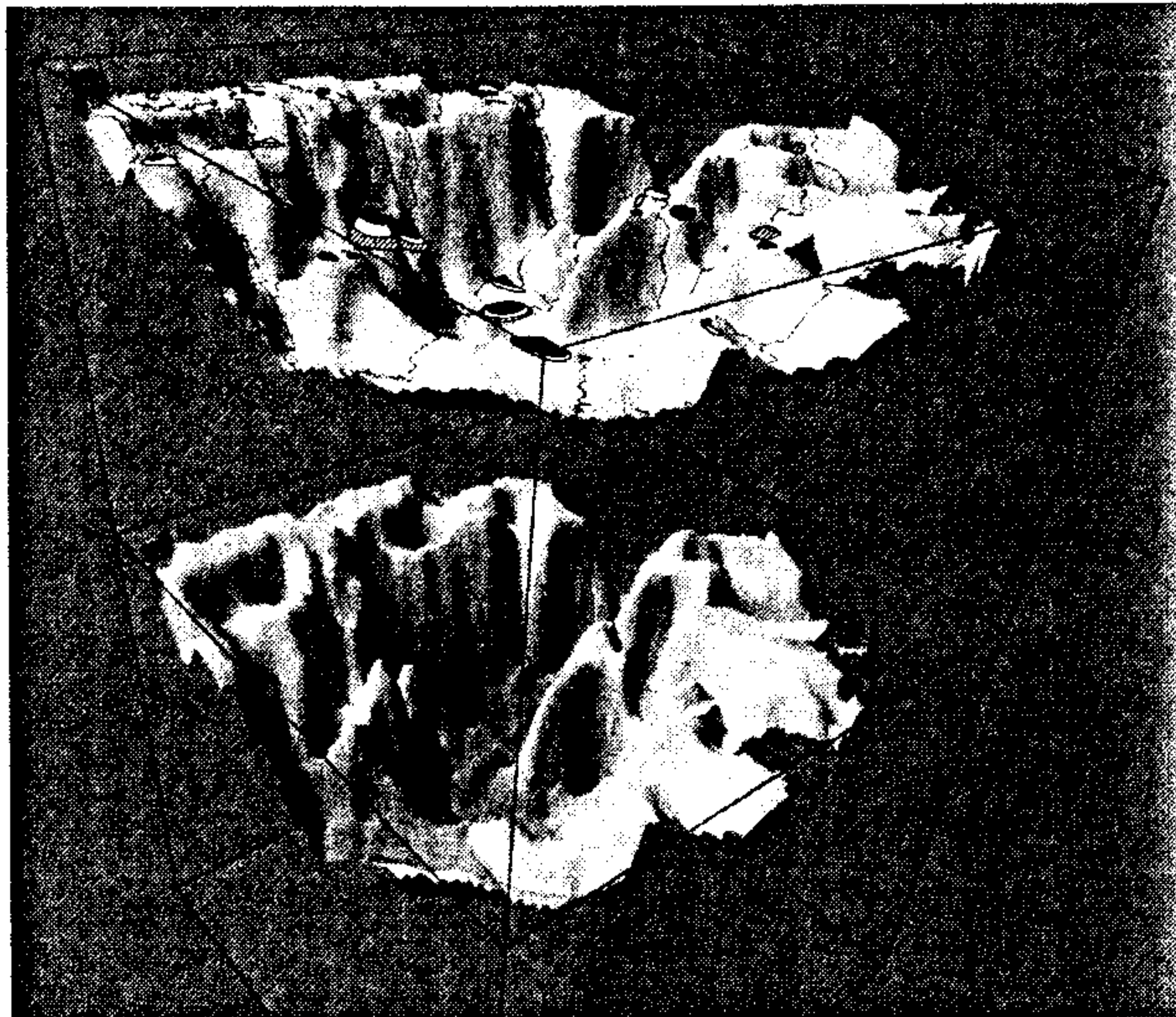


FIG. 6a

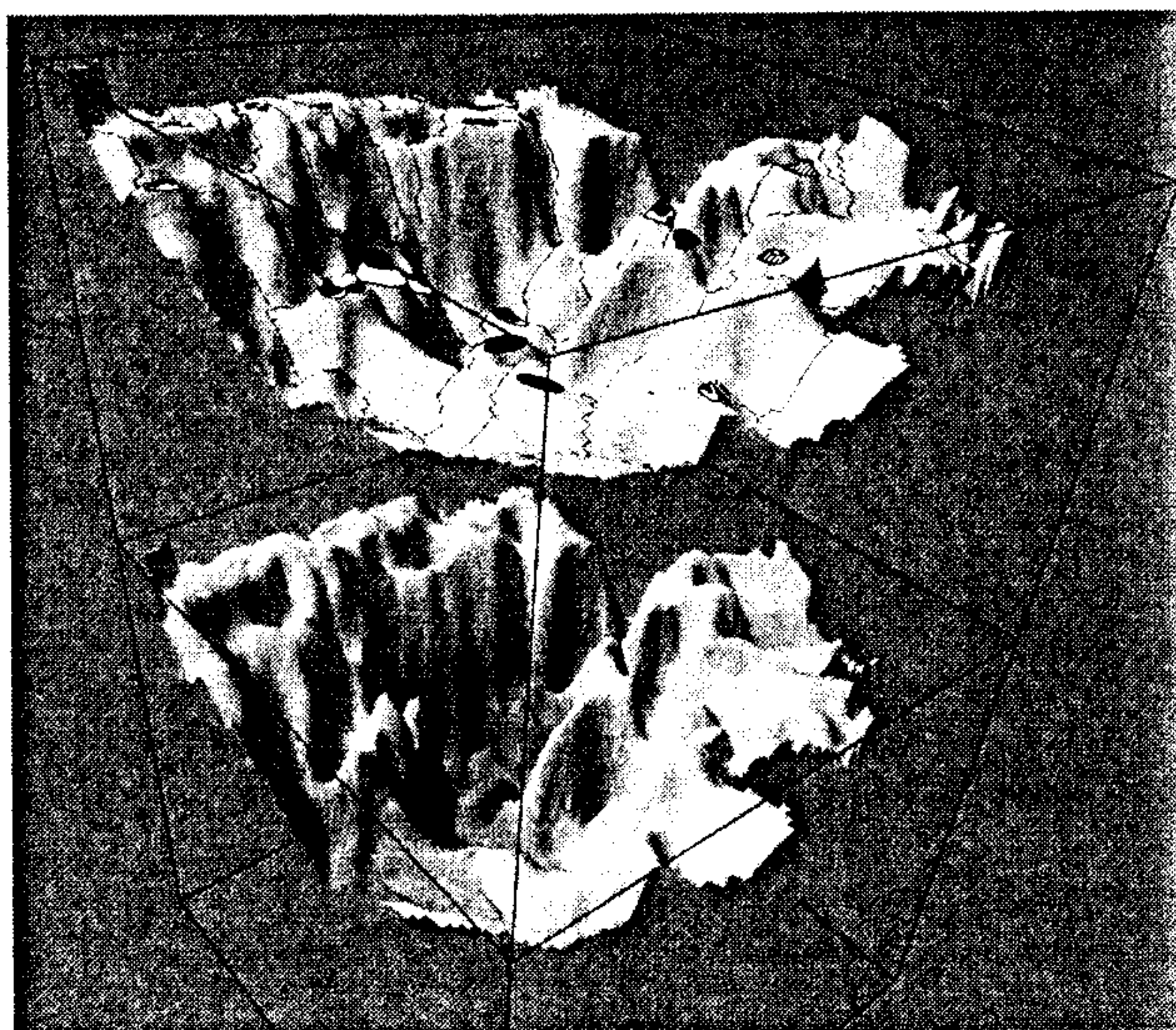


FIG. 6b

