



Modélisation numérique de la sédimentation organique : réévaluation des processus gouvernant sa distribution au Jurassique inférieur en Europe

Benjamin Bruneau

► To cite this version:

Benjamin Bruneau. Modélisation numérique de la sédimentation organique : réévaluation des processus gouvernant sa distribution au Jurassique inférieur en Europe. Sciences de la Terre. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2016. Français. NNT : 2016PA066293 . tel-01454987

HAL Id: tel-01454987

<https://theses.hal.science/tel-01454987>

Submitted on 3 Feb 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Pierre et Marie Curie

Ecole doctorale 398 Géosciences, Ressources Naturelles et Environnement

Institut des Sciences de la Terre de Paris

Modélisation numérique de la sédimentation organique : réévaluation des processus gouvernant sa distribution au Jurassique inférieur en Europe

Par Benjamin BRUNEAU

Thèse de doctorat de Science de la Terre

Dirigée par Isabelle MORETTI et François BAUDIN

Présentée et soutenue publiquement le 2 Novembre 2016

Devant un jury composé de :

M. François GUILLOCHEAU	Rapporteur
M. Ralf LITTKE	Rapporteur
M. Fadi Henri NADER	Examineur
M. Christian GORINI	Examineur
M. Benoit CHAUX	Invité
Mme. Isabelle MORETTI	Directeur de thèse
M. François BAUDIN	Directeur de thèse

Thèse de Doctorat

présentée par

Benjamin Bruneau

ENGIE

UPMC
SORBONNE UNIVERSITÉS

dirigée par

Isabelle Moretti, ENGIE
François Baudin, IStEP



Modélisation numérique de la sédimentation organique : réévaluation des processus gouvernant sa distribution au Jurassique inférieur en Europe

soutenue le 2 novembre 2016
devant le jury composé de :

M. François GUILLOCHEAU	Rapporteur
M. Ralf LITTKE	Rapporteur
M. Fadi Henri NADER	Examineur
M. Christian GORINI	Examineur
M. Benoit Chauveau	Invité
Mme. Isabelle MORETTI	Directeur
M. François BAUDIN	Directeur



IStEP

Ecole Doctorale 398 Géosciences, Ressources Naturelles et Environnement
Unité de recherche : UPMC-Univ Paris 06 & CNRS
UMR 7193 – Institut des Sciences de la Terre de Paris

REMERCIEMENTS

En premier lieu, je tiens à remercier mes directeurs de thèses,

Isabelle Moretti et François Baudin,

pour leur précieux enseignement, leur disponibilité et leur bienveillance.

Je souhaite également exprimer mes remerciements à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à faire avancer mes travaux :

Benoit Chauveau, Christian Gorini, Fadi Henri Nader, François Guillocheau et Ralf Littke, pour avoir accepté de juger mes travaux en participant à mon jury de thèse.

Alain-Yves Huc, Brigitte Doligez, Didier Granjeon, Jean-Pierre Barde et Sébastien Rohais, pour leur participation à mon mi-parcours et leurs conseils.

Didier Granjeon, pour m'avoir initié à Dionisos il y a maintenant 5 ans et pour m'avoir orienté sur ce sujet de thèse.

Benoit Chauveau, pour m'avoir introduit dans le JIP DORS et pour cette fantastique collaboration.

Auriane Bergerol et Marc Villié, pour avoir été des stagiaires exemplaires et pour leurs travaux de qualité qui ont alimenté mes recherches.

Audrey Chereau, Bertrand Coureaud, Carol Schranzhofer, Eric Portier, Guy Desaubliaux, Hubert Buissart, Jean-François Deronzier et Luis Vitor Duarte, pour leur accompagnement et leur investissement pendant les missions de terrain et en carothèque.

Florence Savignac, Marie Salpin, Sylvain Garel, pour leur assistance lors des analyses de laboratoire.

Les membres des équipes de l'ISTeP et d'ENGIE EPI que j'ai pu côtoyer pendant ces trois ans, pour leurs aides et conseils.

Les membres de l'IFP Energie Nouvelles et plus particulièrement Jocelyne Delmas, Mathieu Ducros et Pascal Houel pour m'avoir accordé de leur temps et leurs précieuses connaissances.

Les membres des filiales Dex-Pro et Storengy et plus particulièrement Astrid Forster, David Dequidt et Johannes Böcker, pour leur accueil et leur collaboration.

Les membres de Beicip-Franlab et plus particulièrement Alcide Thebault, Marie Callies et Valérie Huet, pour leur collaboration et leur support technique concernant DionisosFlow.

DionisosFlow et plus particulièrement son module Organic-Rich Sediments, pour sa complicité et ses sauts d'humeur.

Gladisse, pour son support spirituel.

Enfin je remercie ma famille et mes proches, Minus, la Coloc †, le crew d'CSH, le Québou, et tout le reste...

RÉSUMÉ

Les roches mères marines présentent des hétérogénéités spatiales et temporelles de répartition et de qualité. Leur dépôt et leurs variations sont des phénomènes complexes résultant de l'interaction de plusieurs processus. Ces derniers ont fait l'objet de nombreuses études, mais le débat sur leurs impacts relatifs reste vif. L'évolution des outils de modélisation numérique permet désormais une approche quantitative et ouvre la voie à l'étude des couplages entre ces processus.

La bonne connaissance géologique acquise sur les bassins sédimentaires du Jurassique inférieur d'Europe et la présence de plusieurs niveaux de roche mère en font un cas idéal pour caractériser les processus gouvernant la distribution de la matière organique (MO).

Cette thèse présente l'étude et la modélisation numérique de ces bassins qui ont permis de déterminer l'influence relative des facteurs de contrôle de la distribution de la MO à différentes échelles.

Ces travaux apportent de nouveaux éléments au débat portant sur le rôle relatif de ces processus. L'impact primordial de la morphologie des bassins mis en avant va à l'encontre de la littérature dominante dans laquelle la production et la conservation de la MO occultent les autres facteurs. Ces deux processus jouent à l'évidence un rôle important, mais les modalités de leur expression sont entièrement dépendantes de la morphologie des bassins. L'ensemble de ces travaux met en avant la nécessité d'élargir le débat pour une meilleure compréhension de la distribution globale des roches mères, en testant la même approche modélisatrice sur d'autres intervalles riches en MO, dans d'autres contextes paléogéographiques et pour d'autres types de kérogène.

ABSTRACT

Marine source-rocks have heterogeneities both in their distribution and quality over time and space. The deposition of these organic-rich sediments and their variations are complex phenomena resulting from the convergence of several processes which were the subject of many studies. However, the debate on their relative roles and impacts remains strong. The evolution of numerical modelling tools now allows a quantitative approach and new studies about the interaction between these processes.

Because of their general context and the presence of several source-rocks, the Lower Jurassic sedimentary basins of Europe are an ideal case to characterize the processes governing the distribution of organic matter (OM).

This thesis presents the study and the numerical modelling of these basins which allowed to determine the relative influence of the control factors of the OM distribution at various scales. These works bring new elements into the debate about the relative role of these processes. The primary impact of the basin morphology highlighted by these works goes against the dominant literature in which the production and preservation of OM conceal the other factors. Both of these processes obviously play an important role in the distribution of organic-rich layers, but their setting are entirely dependent on the basin morphology. All this work highlights the need to widen the debate for a better understanding of the source rock global distribution, by using the same modelling approach with others organic-rich intervals, others palaeogeographic contexts and for others kind of kerogens.

Sommaire

INTRODUCTION GENERALE.....	1
CHAPITRE 1 – LA MATIERE ORGANIQUE MARINE, ETAT DE L’ART	5
Introduction	6
.1 Production et transport.....	7
.1.1 La productivité primaire	7
.1.2 Mesure	8
.1.3 Facteurs de contrôle	11
.1.4 Flux de carbone	12
.1.5 Transport	14
.2 Conservation.....	15
.2.1 Composition	16
.2.2 Niveau d’oxygène	17
.2.3 Taux de sédimentation	20
.3 Analyse de la matière organique	21
.3.1 Pyrolyse Rock-Eval.....	22
.3.2 Carbolog	23
.3.3 Minéralogie	25
.3.4 Palynofacies	26
.4 Modèles théoriques.....	26
.4.1 Modèles théoriques	27
.4.2 Modèles numériques	34
Conclusion	35
CHAPITRE 2 – LE JURASSIQUE INFERIEUR D’EUROPE.....	37
Introduction	38
.1 Contexte géologique et état de l’art.....	38
.1.1 Le Jurassique inférieur	38
.1.2 Contexte géodynamique	39
.1.3 Paléogéographie	39
.1.4 Volcanisme.....	40
.1.5 Paléoclimat.....	42
.1.6 Chronostratigraphie	44
.1.7 Cadre séquentiel	48
.2 Lithostratigraphie du Jurassique inférieur ouest-européen.....	50
.2.1 Hettangien	50
.2.2 Sinémurien inférieur.....	53
.2.3 Sinémurien supérieur.....	53
.2.4 Pliensbachien inférieur	55
.2.5 Pliensbachien supérieur.....	55
.2.6 Toarcien inférieur et moyen	56
.2.7 Toarcien supérieur.....	58
.2.8 Taux de sédimentation	59
.2.9 Synthèse et commentaires	59
.3 Les roches mères	60
Conclusion	67

CHAPITRE 3 – APPROCHE SCIENTIFIQUE ET METHODOLOGIE	69
Introduction	70
.1 Problématique et approche	70
.2 Compilation des données	71
.2.1 Approche naturaliste	71
.2.2 Analyses de laboratoire	73
.3 Modélisation numérique	76
.3.1 DionisosFlow	76
.3.2 DionisosFlow Matière Organique	77
CHAPITRE 4 – ETUDE DU BASSIN LUSITANIEN	83
Introduction	84
.1 3D Numerical Modelling of Marine Organic Matter Distribution: example of the Early Jurassic sequences of the Lusitanian Basin (Portugal)	84
Conclusion	108
CHAPITRE 5 – ETUDE DES BASSINS NORD-EUROPÉENS	111
Introduction	112
.1 3D stratigraphic forward numerical modelling approach for prediction of organic-rich deposits and their heterogeneities	112
Conclusion	138
CHAPITRE 6 – ETUDE STATISTIQUE DES PROCESSUS MODELISES	141
Introduction	142
.1 Modélisation Numérique et Etude Statistique de la Distribution et des Hétérogénéités de la Matière Organique du Jurassique Inférieur du Bassin Parisien	142
CHAPITRE 7 – DISCUSSION GENERALE	165
Introduction	166
.1 L'approche numérique et statistique	166
.2 Lois empiriques et équations	169
.3 Hiérarchisation des processus	172
.4 Recommandations	177
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES	181
Conclusion	182
Perspectives	184
BIBLIOGRAPHIE	187
ANNEXES	201

INTRODUCTION GENERALE

Problématique

Les roches mères pétrolières marines présentent des hétérogénéités tant dans leur répartition que dans leur composition en fonction du temps et de l'espace. Le dépôt de ces sédiments plus ou moins riches en matière organique et leurs hétérogénéités sont des phénomènes complexes résultant de la convergence de plusieurs processus. Ces derniers peuvent-être répartis en deux catégories. La première regroupe les processus à l'origine d'une forte productivité primaire qui contrôlent directement le potentiel de matière organique mis à disposition pour la sédimentation. Dans de nombreuses conditions, cette matière organique est rapidement dégradée. La seconde catégorie regroupe les processus en faveur de la conservation et d'une faible dilution de cette matière organique.

Ces facteurs de contrôle ont fait l'objet de nombreuses études depuis plus d'une trentaine d'années (e.g. [Demaison et Moore, 1980](#) ; [Pedersen et Calvert, 1990](#) ; [Wignall, 1994](#) ; [Zonneveld et al., 2010](#)). Néanmoins le débat sur leur rôle relatif et leurs impacts reste ouvert. La quantification et la hiérarchisation des phénomènes clés intervenant dans l'histoire et l'évolution de la matière organique depuis sa production jusqu'à son enfouissement sont devenus les grands enjeux de cette thématique (e.g. [Mann et Zweigel, 2008](#)).

Par ailleurs, l'évolution des outils numériques permet maintenant une approche quantitative à partir de modèles théoriques précédemment élaborés et ouvre la voie à de nouvelles hypothèses de travail. En effet, les lois actuellement utilisées dans les simulations numériques d'évolution de la matière organique sont en partie déduites de manière empirique depuis l'observation de systèmes actuels et l'analyse statistique de données d'enregistrements sédimentaires. La conception de modèles numériques calibrés est une étape charnière dans la compréhension des facteurs de contrôle et de leurs interactions régissant la distribution et la qualité des roches mères et dans l'élaboration de lois physiques traduisant les processus impliqués.

Objectif

Cette thèse vise à apporter une réflexion sur la distribution de la matière organique marine, ses hétérogénéités et leur évolution dans le temps et l'espace. Cette réflexion est élaborée à partir de l'étude, de la caractérisation et de la quantification relative des facteurs de contrôle et des processus régissant la production primaire et la préservation de la matière organique. L'objectif est de proposer une hiérarchisation des facteurs clés et de proposer un modèle prédictif de l'histoire de la matière organique marine. L'évaluation de la répartition, de la quantité et de la qualité de la matière organique grâce à la modélisation numérique est la dernière étape nécessaire dans la prédiction des roches mères pétrolières.

Démarche

L'investigation scientifique servant de support à cette réflexion a été construite à partir de l'étude des bassins sédimentaires du Jurassique inférieur d'Europe. Le contexte général et l'histoire de ces bassins en font un cas idéal pour caractériser les processus à l'origine des dépôts riches en matière organique et de leurs variabilités. De très nombreuses études ont été publiées sur les roches mères de cette période, comme les fameux Schistes cartons d'âge Toarcien du bassin de Paris. Le développement et la calibration de plusieurs méthodes analytiques ont directement été faits sur ces niveaux riches (e.g. pyrolyse Rock-Eval, Carbolog) ([Espitalié et al., 1985](#) ; [Carpentier et al., 1991](#)). De manière générale la littérature scientifique sur le contexte géologique du Jurassique d'Europe est foisonnante. Par ailleurs, cette importante bibliographie a été renforcée via la collaboration des filiales de ENGIE (i.e. DEXpro, Storengy) et de l'IFP Energies Nouvelles avec la mise à disposition de leur base de données patrimoniales.

La démarche scientifique adoptée s'articule en 6 chapitres. Les 3 premiers chapitres présentent l'état de l'art, le contexte général et l'approche scientifique utilisée durant ces travaux :

- Une synthèse bibliographique faisant un état des connaissances sur la matière organique et sur la formation des roches mères constitue le **CHAPITRE 1**.
- Le **CHAPITRE 2** comprend une synthèse bibliographique du contexte géologique général au Jurassique inférieur en Europe.
- L'approche scientifique, la méthodologie utilisées et les analyses effectuées pour les différentes études sont résumées dans le **CHAPITRE 3**.

Les 3 chapitres suivants présentent les différentes études sur la distribution et les hétérogénéités de la matière organique menées aux cours de cette thèse, les articles associés ainsi que les réflexions portant sur ces travaux :

- L'étude et la modélisation numérique du bassin Lusitanien est présentée dans le **CHAPITRE 4**.
- Le **CHAPITRE 5** présente l'étude des bassins nord-européens et la modélisation numérique grande échelle associée.
- L'analyse statistique des paramètres issus du modèle numérique du bassin Parisien est présentée dans le **CHAPITRE 6**. L'étude des palynofaciès du forage de Couy-Sancerre ayant permis la calibration du modèle est présentée dans la section **ANNEXES**.
- Dans le **CHAPITRE 7**, une discussion générale, des conclusions et perspectives présentent les principales leçons tirées de ce travail.

CHAPITRE 1 – LA MATIERE ORGANIQUE MARINE, ETAT DE L'ART

Introduction

Les dépôts riches en matière organique des bassins sédimentaires représentent un des principaux réservoirs dans le cycle global du carbone (**Fig. 1**). En environnement marin cette matière organique est principalement composée de matériel dérivé de nombreuses espèces du phytoplancton et des bactéries. Le phytoplancton, en effet, contient les producteurs primaires des eaux de surface et les premiers consommateurs de la chaîne alimentaire (e.g. [Suess, 1980](#)). La matière organique peut également être composée de matériel allochtone lié à l'érosion des terres émergées et introduit dans les bassins sédimentaires par transport fluvial ou éolien. Elle peut aussi être formée de produits de transformation chimique et de réaction de condensation, ou encore de produits de synthèse dérivés de l'activité microbienne hétérotrophe qui entraîne sa décomposition pendant la diagenèse. Seule une petite fraction du matériel organique produit dans les eaux de surfaces atteint les fonds marins. Cette fraction est à nouveau dégradée par les processus de reminéralisation aérobie ou anaérobie ([Hedges and Keil, 1995](#) ; [Middelburg and Meysman, 2007](#)).

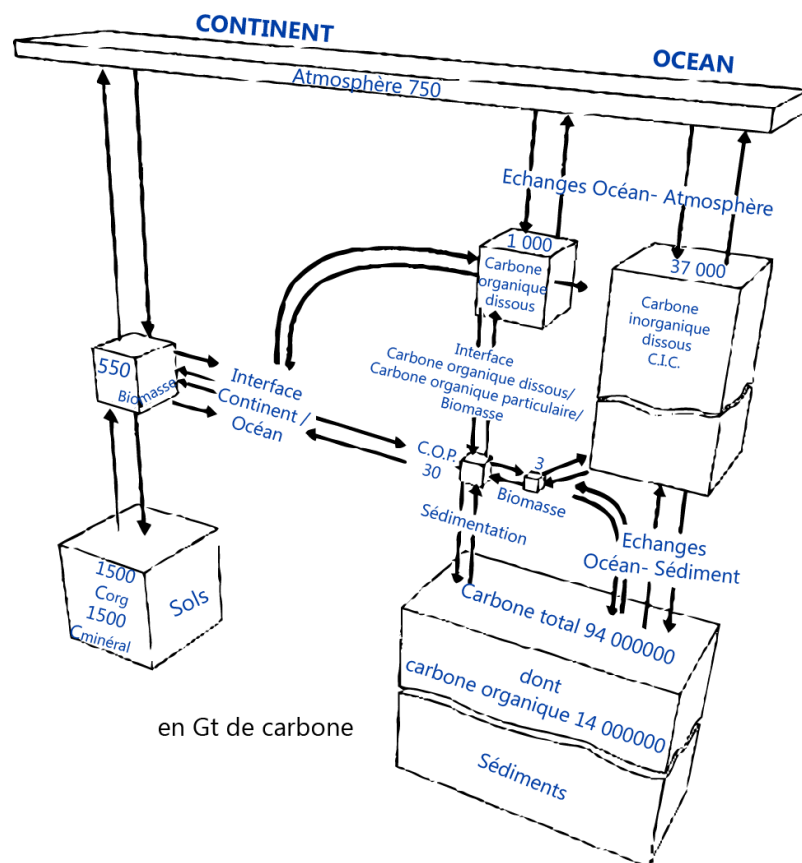


Fig. 1. Estimation de la taille des différents réservoirs superficiels du carbone (en Gt de carbone) et échange entre ces réservoirs. COP : carbone organique particulaire (d'après [Saliot, 1994](#)).

Les recherches publiées ces trente dernières années ont convergé vers la mise en évidence d'une conservation hautement sélective de la matière organique. La quantité et la composition de cette fraction préservée dans les sédiments marins varient énormément en fonction des régions et des environnements de dépôt. Les effets chimiques, physiques et biologiques de la dégradation de la matière organique ainsi que la fiabilité des proxies qui permettent de retracer cette histoire constituent le cœur des débats actuels de cette thématique. Pour autant, les études intégrées couplant et quantifiant l'impact de l'ensemble de ces facteurs restent peu nombreuses (e.g. [Felix, 2014](#)). Le caractère complexe et multi-variable de la formation et de l'évolution de la matière organique rend les processus en jeu difficiles à hiérarchiser. Depuis une dizaine d'années, de plus en plus d'études ont recours à la modélisation numérique dans l'optique d'apporter un aspect quantitatif supplémentaire aux débats actuels dans ce domaine.

Cette synthèse bibliographique a pour objectif de présenter de manière non-exhaustive les facteurs clés de la production de matière organique marine et de sa conservation. L'état de l'art ne fait pas référence à la matière organique terrestre, bien que certains processus décrits soient comparables. Une revue des méthodes d'analyses de la matière organique utilisées pendant ces travaux est également proposée. La dernière partie de cette synthèse présente les grands modèles théoriques proposés jusqu'à maintenant et la façon dont ces concepts sont intégrés dans les modèles numériques actuels.

.1 Production et transport

.1.1 La productivité primaire

Le phytoplancton flottant dans la zone photique constitue la plus grosse part de matière organique marine ([Fig. 2](#)). La production photosynthétique de cette matière organique est appelée production primaire car elle représente la première étape de la production de la quasi-totalité de la nourriture pour l'ensemble des organismes marins hétérotrophes. D'autres producteurs du milieu océanique contribuent à cet apport (bactéries, algues macrophytes). Une autre fraction de cette matière organique est apportée aux océans via les rivières ou par l'atmosphère. Le phytoplancton marin est en majorité constitué d'algues unicellulaires et de bactéries autotrophes, dont la morphologie et les processus chimiques sont sensiblement différents. Mais, toutes ces formes photosynthétiques convertissent la lumière du soleil en énergie chimique. Cette énergie est utilisée pour synthétiser les constituants du vivant à partir du dioxyde de carbone, de l'eau et des nutriments ([Falkowski et Raven, 2007](#)). Une partie de cette matière organique produite est directement excrétée par le phytoplancton sous forme soluble, une fraction est perdue lorsque les cellules phytoplanctoniques sont détruites quand elles sont mangées par le zooplancton, et une autre portion est perdue pendant le repas, la mort ou encore la dégradation des participants suivants de la chaîne alimentaire. Les bactéries, présentes partout dans les eaux marines, consomment la matière organique dissoute tout en contribuant à une partie de sa production.

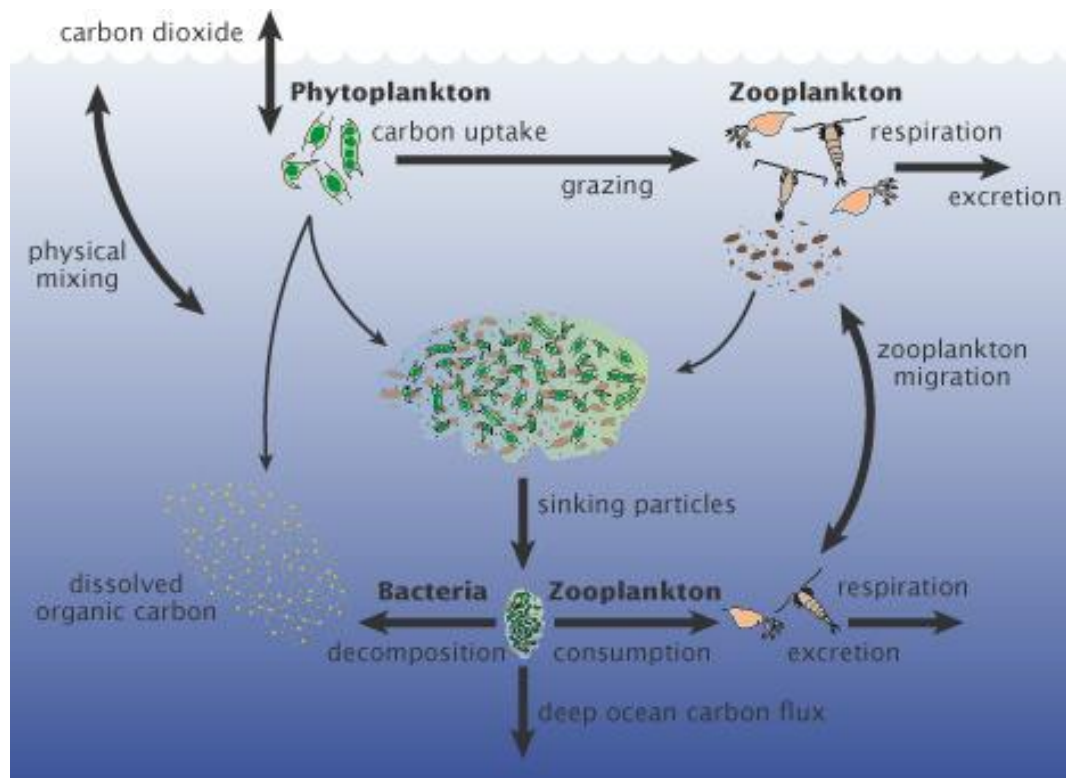


Fig. 2. Le phytoplancton est responsable de la plus grande partie du transfert de dioxyde de carbone depuis l'atmosphère vers l'océan. Le dioxyde de carbone est consommé pendant la photosynthèse et le carbone est incorporé dans le phytoplancton. La plus grande partie du carbone retourne près de la surface des océans quand les organismes phytoplanctoniques sont mangés ou décomposés, mais une partie est exportée vers le fond des océans (d'après le projet JGOFS).

1.2 Mesure

Le taux de production primaire, ou en d'autres termes, le taux de synthèse de matière organique marine, est difficile à mesurer précisément. Toutes les techniques actuelles permettent d'obtenir des approximations calibrées de manière empirique. Les taux de production observés dans la nature varient latéralement, verticalement et dans le temps. Pour chacun de ces cas, les variations peuvent atteindre plusieurs ordres de grandeur, il est donc difficile d'obtenir une quantification entièrement satisfaisante pour la totalité d'un océan.

La « production nette », qui correspond au total de carbone fixé par le phytoplancton (CO_2 converti en matière organique) corrigé des besoins en carbone pour la respiration, peut être calculée de manière ponctuelle grâce à la méthode du carbone-14 (Steemann Nielsen, 1952).

Une des premières estimations globales avec cette méthode est fournie par Berger et al. (1988, 1989) à partir de plus de 9000 données (Fig. 3). Les zones non échantillonnées, malgré cette énorme quantité d'analyses, ont été comblées par la mesure de la concentration de phosphate dans l'eau, convertie de manière empirique en « production nette ».

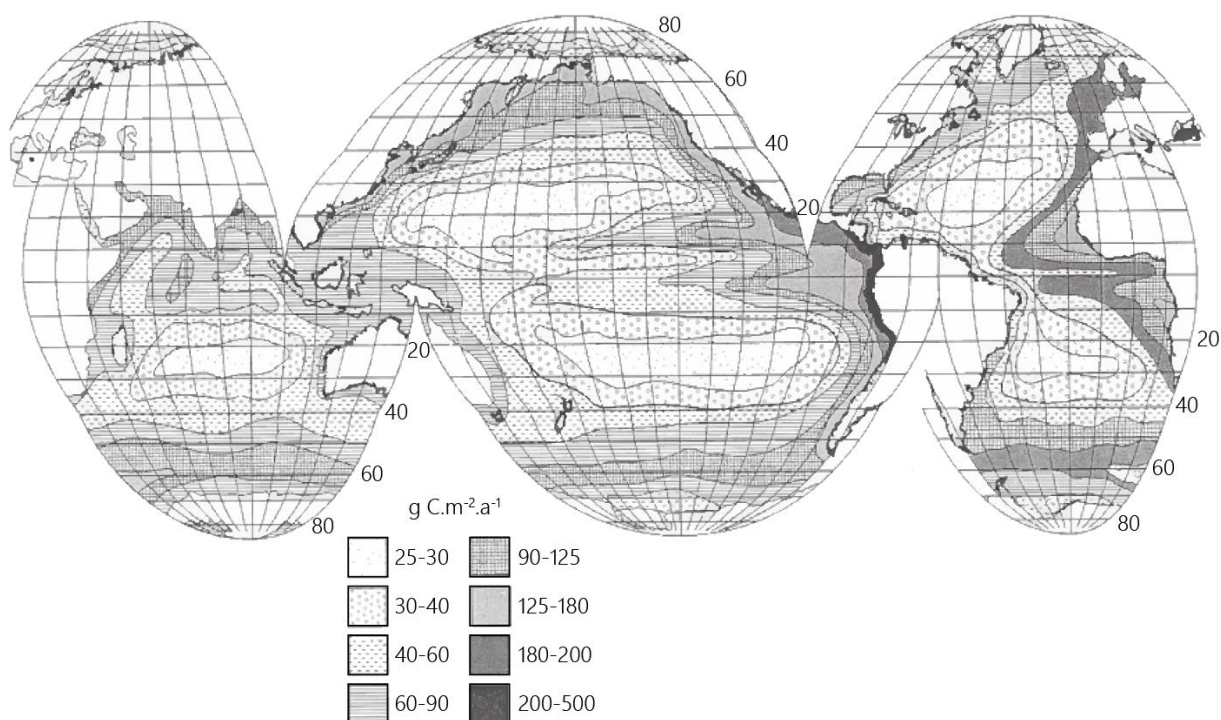


Fig. 3. Carte de distribution de la « production nette » à l'échelle globale produite à partir de l'analyse en carbone-14 et de la concentration en phosphate (Berger et al., 1989).

La plupart des mesures par carbone-14 datant d'avant les années 80 sont probablement biaisées par la contamination des réactifs par des traces de métal en assez grande concentration pour diminuer de manière significative l'activité des phytoplanctons (Fitzwater et al., 1982).

Les techniques plus récentes d'analyse satellitaire permettent d'établir la concentration de chlorophylle à partir d'algorithmes de conversion de colorimétrie en valeurs de carbone-14 associées (Fig. 4 et Fig. 5). Cependant ces méthodes montrent un important biais dans les zones de forte agitation, ou plus généralement là où la turbidité des eaux dépasse un certain seuil et masque l'activité chlorophyllienne. De plus, tous les types de chlorophylle ne sont pas mesurés, et l'observation ne se fait que dans la partie superficielle des eaux et ne prend pas en considération toute la zone photique.

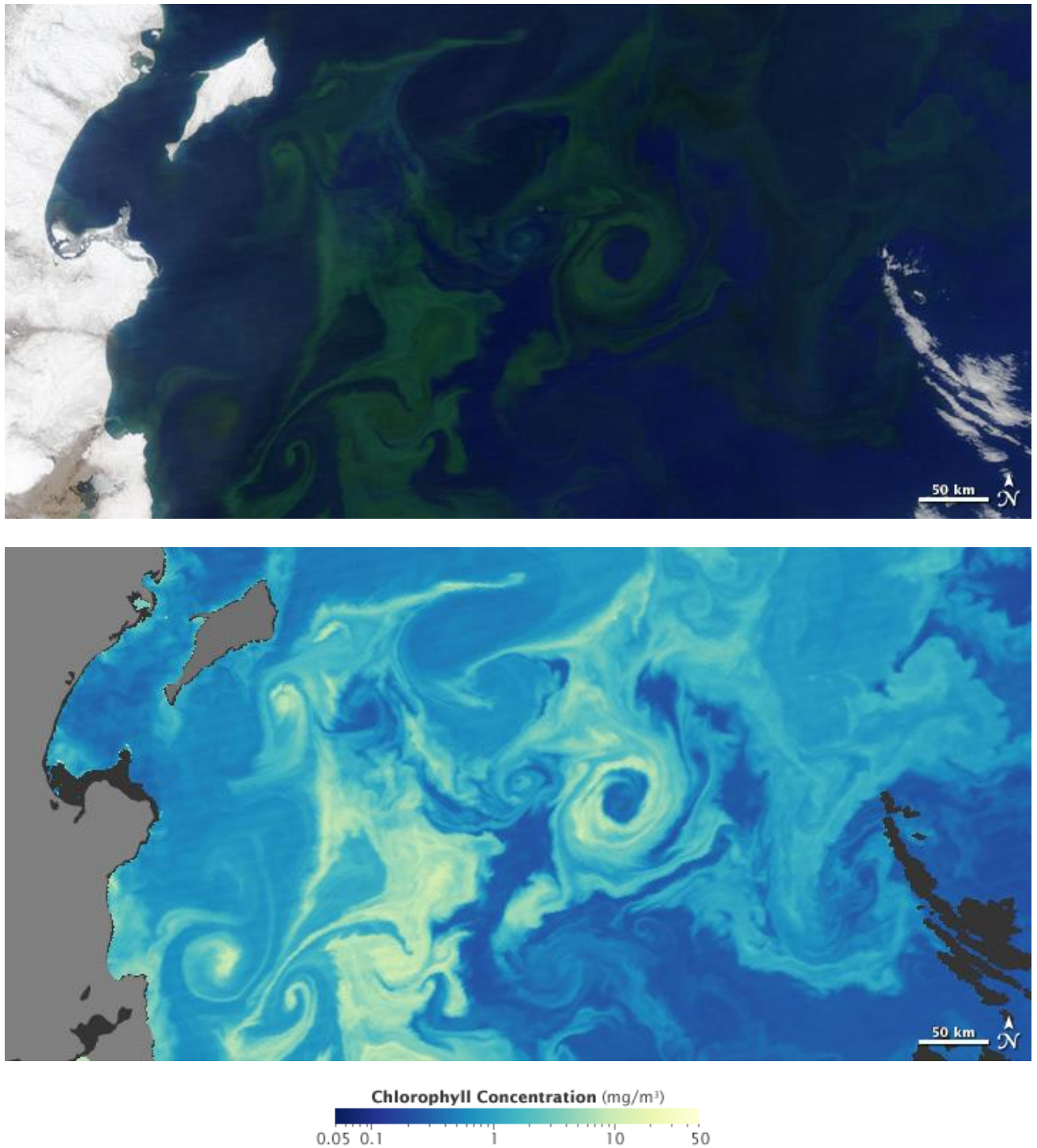


Fig. 4. Sur les images satellites en couleurs naturelles (image du haut), les phytoplanctons apparaissent comme des tourbillons de couleurs. Ces observations sont utilisées pour estimer la concentration en chlorophyle dans les océans (image du bas). Ces images montrent un bloom près de la péninsule du Kamchatka (Extrême-Orient russe) le 2 juin 2010 (Images du projet [MODIS](#), coordonnées 56,5° à 59,5° Nord 162° à 175° Est).

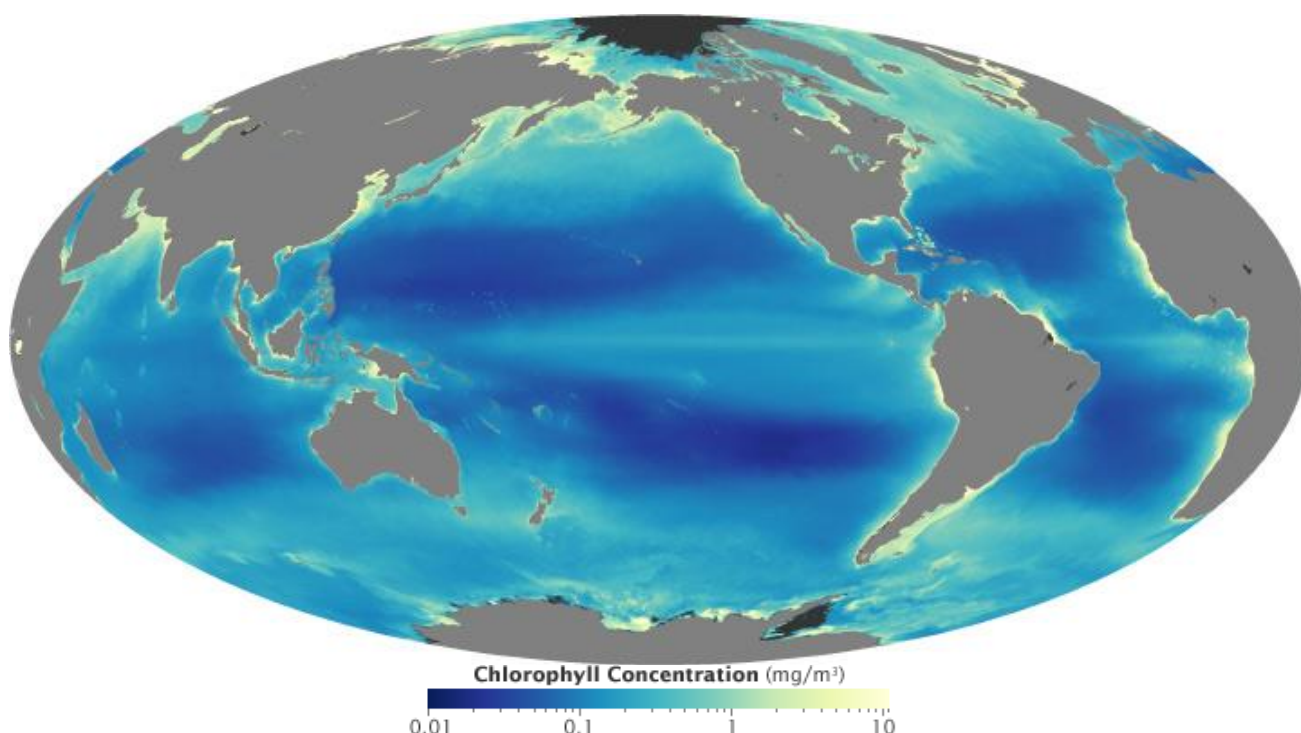


Fig. 5. Carte de la concentration moyenne en chlorophylle entre Juillet 2002 et Mai 2010. Le phytoplancton est plus abondant (zones jaune : forte concentration en chlorophylle) dans les hautes latitudes et dans les zone d'upwelling le long de l'équateur et près des côtes. Il est en revanche plus rare (zone bleue foncée) dans les zones océaniques éloignées, où la quantité de nutriments est faible (Images du projet [SeaWiFS](#)).

.1.3 Facteurs de contrôle

Certains phénomènes globaux ou locaux peuvent, de manière occasionnelle, augmenter la production primaire. De manière générale tous les processus impactant l'apport de nutriments ou leur transport dans les océans auront un effet sur la production primaire.

Dans le cas d'upwelling, la contrainte éolienne exercée par les alizés sur les courants marins génère une circulation des eaux superficielles, orientée du continent vers l'océan ([Garrett, 1991](#)). La masse d'eau déplacée vers le large est remplacée par une masse d'eau advectée des parties plus profondes par un courant ascendant. La géométrie de ce courant est influencée par la morphologie de la marge et le régime local des vents. Cette circulation, qualifiée de cellule d'upwelling, entraîne la remontée d'eaux intermédiaires enrichies en nutriments. Cet apport en nutriment permet aux organismes phytoplanctoniques de proliférer, et entraîne l'augmentation de la production primaire. Ces zones d'upwelling localisées le long de l'équateur grâce à la convergence des alizés, ou le long des marges ouest de plusieurs continents, sont parmi les écosystèmes les plus productifs de l'océan. Par contraste, le phytoplancton est beaucoup plus rare dans les gyres océaniques éloignées en raison du manque de nutriments.

De cette manière, la circulation d'eau océanique à grande échelle, ou circulation thermohaline est un facteur clé de la mise en place de cellule d'upwelling. Liée aux écarts de température et de salinité des masses d'eau, cette circulation permet aux eaux des hautes latitudes de plonger en profondeur et de se charger en nutriments. Ces nutriments sont ramenés à la surface avec l'appel d'eau créé par les alizés dans les zones d'upwelling.

De la même manière que les plantes, le développement du phytoplancton varie avec la saisonnalité. Aux hautes latitudes, des blooms ont lieu pendant le printemps et l'été, quand la quantité de lumière augmente et que le mélange de l'eau par les tempêtes d'hivers perdure. Par contraste, la population de phytoplancton chute pendant l'été dans les océans subtropicaux. L'eau de surface se réchauffe rapidement à cette période et le mélange avec les eaux plus profondes, froides et denses devient difficile. Aux basses latitudes, les blooms saisonniers sont souvent liés au changement des vents associés à la mousson. Des influences plus globales et s'étalant sur plusieurs années sont également observées comme le phénomène El Niño (ENSO).

.1.4 Flux de carbone

L'écosystème phytoplanctonique localisé dans la zone photique est caractérisé par la rapide métabolisation de la matière organique produite. Dans les faits, ce genre de système n'est jamais à l'équilibre et répond constamment aux variations induites par les vents, les turbulences, le climat et ses saisons, et les facteurs biotiques. Cependant, la schématisation d'une pluie continue, mais pas constante ([Honjo et al., 2008](#)), de particules organiques s'enfonçant depuis la surface vers les fonds marins est clairement mise en avant par plusieurs auteurs à la fin des années 80 sur la base des études de pièges à sédiments (e.g. [Berger et al., 1989](#) ; [Martin et al., 1987](#)). Les résidus organiques présentent en général des densités proches de celle de l'eau. Leur chute dans la colonne d'eau sous l'effet de la gravité est donc relativement lente. Leur transfert vers les fonds marins résulte d'avantage de leur association avec des minéraux sous forme d'agrégats ou de pelotes fécales de zooplancton. Ces associations permettent à la matière organique de sédimenter sous la forme de « neige marine ». Cet export depuis la zone euphotique peut varier de quelques jours à plusieurs années en fonction de la taille des particules et de la profondeur d'eau. Pendant cette durée, la matière organique est exposée à la consommation par le reste des organismes de la chaîne alimentaire. La notion de « production exportée » est alors introduite et désigne la fraction de « production nette » qui n'est pas consommée et qui est exportée vers les fonds marins. Cette définition permet de s'affranchir des variations majoritairement localisées dans les eaux superficielles et de mesurer, par la méthode du carbone-14, un flux de carbone à n'importe quelle profondeur ([Fig. 6](#)).

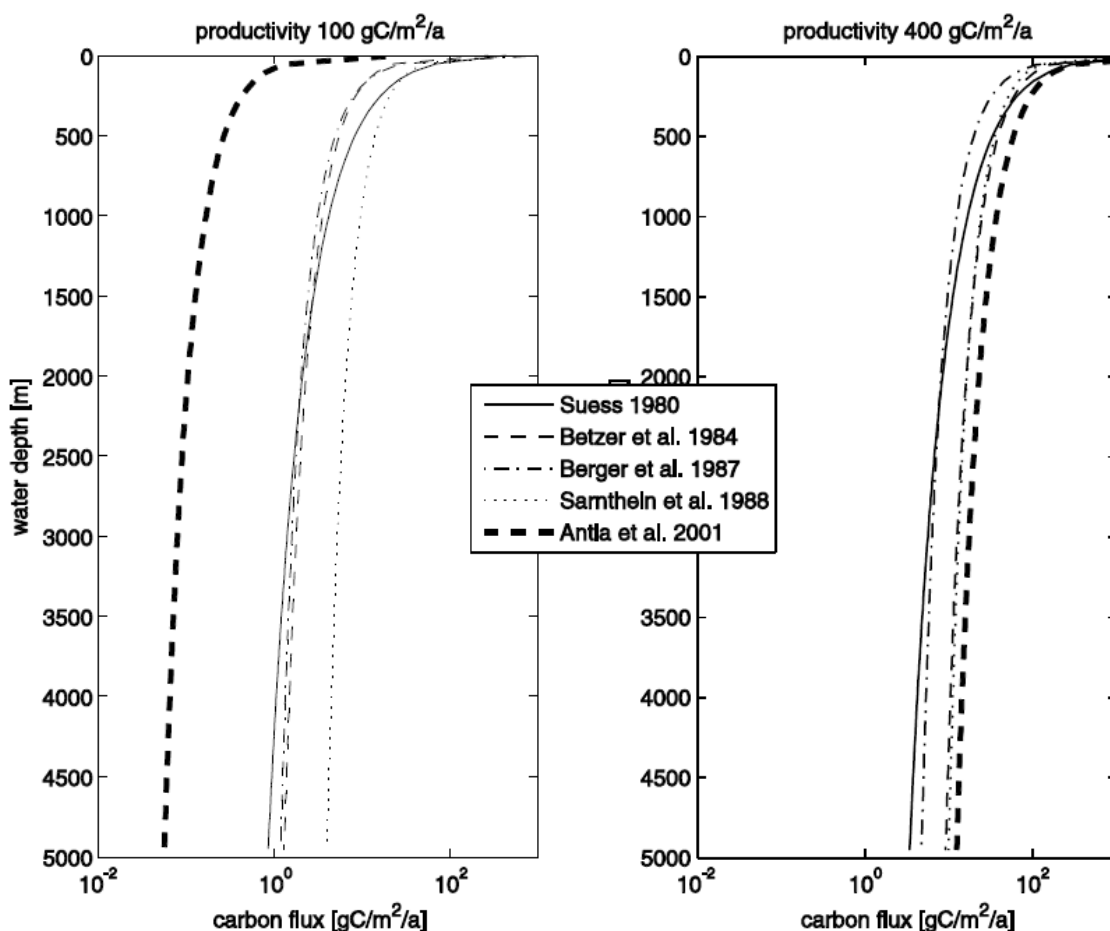


Fig. 6. Ensemble des flux de carbone proposés dans la littérature et exprimés selon deux productivités primaires théoriques différentes (d'après Felix, 2014).

Aucune des équations de flux de carbone ne se corrèle parfaitement aux données mesurées et plusieurs problèmes persistent. La valeur de productivité primaire mesurée reste relativement arbitraire et ne reflète pas nécessairement le flux de carbone mesuré en profondeur en raison du décalage spatial et temporel entre deux prises d'échantillon. De plus, toutes ces courbes suggèrent une augmentation non linéaire du flux de carbone en fonction de la productivité primaire, or cette dernière est souvent calculée selon la moyenne arithmétique annuelle. Cet aspect est encore plus important dans les zones à saisonnalité extrême, en cas d'efflorescence algale ou encore d'upwelling (voir paragraphe suivant). Malgré les incertitudes sur ces paramètres, Martin et al. (1987) ont estimé que la « production exportée » mondiale à une profondeur d'environ 100 m était de l'ordre de 7,4 Gt par an. Ces auteurs ont proposé une équation de flux de carbone en fonction de la profondeur d'eau exprimée par :

$$F = F_{100} \left(\frac{z}{100} \right)^b$$

Avec F le flux de carbone organique (en $\text{mol.m}^{-2}.\text{an}^{-1}$) ; $F_{100} = 1,53 \text{ mol.m}^{-2}.\text{an}^{-1}$ correspond au flux à 100 m de profondeur ; z pour la profondeur (en m) ; la valeur proposée pour le coefficient b est de 0,86 et est liée aux variations de productivité.

Bishop (1989) a montré que l'équation de Martin et al. (1987) correspondait aux données mesurées dans la plupart des pièges à sédiment au-delà de 100 m de profondeur. Cette équation peut donc être utilisée de manière relativement efficace pour estimer le flux de carbone à partir de cette profondeur et est aujourd'hui une référence (Fig. 7).

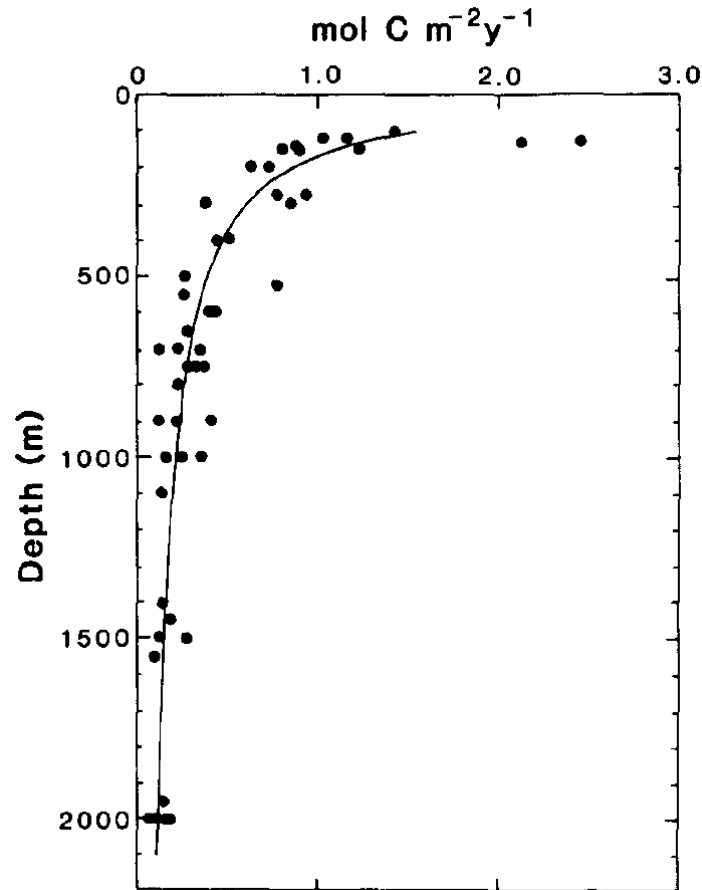


Fig. 7. Flux de carbone organique pour l'océan ouvert. Les valeurs utilisées sont les moyennes calculées à différentes profondeurs dans l'océan Pacifique. Le flux de carbone initial pour calculer l'équation est estimé à 100 m de profondeur (modifié de Martin et al., 1987).

1.5 Transport

En termes de dynamique sédimentaire, les agrégats contenant de la matière organique ont un comportement similaire à celui des sédiments fins. Leur mobilisation et redistribution spatiale va s'effectuer par resuspension, advection et phénomènes tractifs sous l'influence de courants de fond ou à l'occasion d'événements tels que les tempêtes, en suivant les gradients d'énergie hydraulique (Thomsen et Van Weering 1998 ; Thomsen et McCave, 2000 ; Thomsen et Gust, 2000 ; Beaulieu, 2003 ; Inthorn et al., 2006). Le dépôt définitif de la matière organique et son enfouissement dans le sédiment se réalise dès que cette dernière n'est plus soumise à des processus hydrodynamiquement suffisamment efficaces. La base de la zone d'action des vagues de tempête est de ce point de vue une limite à prendre en considération, et la tranche d'eau sous-

jacente représente l'environnement où se situerait le plus fort potentiel d'accumulation en matière organique des eaux de fond. Le dépôt de ces agrégats s'effectuerait sous forme de petits clinoformes à l'échelle centimétrique avec épaissement des « foresets » dans la direction du déplacement ([Schieber et al., 2007](#) ; [Macquaker, 2007](#)). Ces clinoformes sont des structures à laminations obliques « cross-laminated » (**Fig. 8**). C'est la compaction ultérieure qui donne l'aspect apparemment laminé des roches mères tel que nous le connaissons.

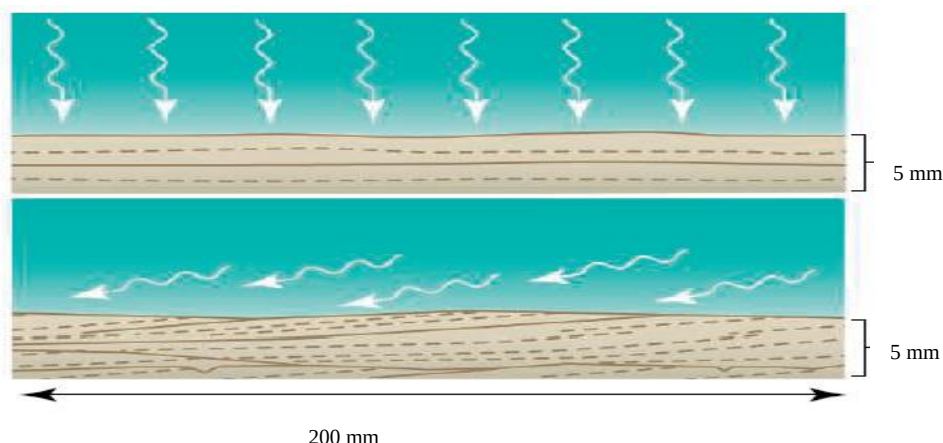


Fig. 8. Laminassions obliques en section fine interprétées comme du transport « bedload » (d'après [Macquaker et Bohacs, 2007](#) ; [Trabucho-Alexandre et al., 2012](#)).

La mise en place des sédiments à grains fins riches en matière organique par des processus d'advection, voire sous la forme de turbidites fines avait été suggérée depuis un certain nombre d'années ([Arthur et al., 1984](#) ; [Dean et al., 1984](#) ; [Stow et al., 2001](#)).

Des mesures basées sur des datations par le carbone-14 dans les niveaux néphéloïdes et les sédiments superficiels au large de la Namibie tendent à montrer que les temps concernés par ce déplacement advectif de la matière organique au sein de la « couche limite » avant enfouissement définitif se comptent en millier d'années ([Inthorn et al., 2006](#)). Cette valeur est faible en terme de temps géologique, mais peut ne pas être négligeable au regard des processus sédimentaires, notamment pendant les périodes de « Icehouse » avec des variations « rapides » et conséquentes du niveau de la mer.

.2 Conservation

Même après avoir atteint le fond, la majorité de la matière organique est vouée à être dégradée. Cette dégradation est liée en grande partie à sa consommation et à sa métabolisation par les êtres vivants. Tous les phénomènes diminuant l'action des organismes sur la matière organique peuvent ainsi être considérés comme des processus favorisant sa conservation.

La plupart des facteurs influençant cette conservation a été identifiée, mais de nombreux mécanismes régissant ces facteurs restent partiellement, voire peu compris. Pour la matière organique terrestre, les processus de dégradation dans les sols et pendant le transport influencent très largement sa structure moléculaire et déterminent son potentiel de dégradation quand elle entre en environnement marin (Sollins et al., 1996). Pour la matière organique marine, la dégradation a lieu exclusivement en domaine marin.

.2.1 Composition

La matière organique d'origine marine comme terrestre contient des composants labiles ou réfractaires. Cette caractéristique intrinsèque est directement liée à la structure moléculaire et à la forme physique que prennent ces composants dans la nature (Hedges et Oades, 1997). Dans certaines conditions favorables, plusieurs types de biopolymères ou de géopolymères (pendant la diagenèse précoce) peuvent être produits en fonction de l'environnement local (Fig. 9). Ces polymères permettent une meilleure conservation de la matière organique. En milieu anoxique, certaines molécules peuvent réagir avec le H_2S ou les polysulfures et former une substance polymérique croisée via des ponts (poly)sulfures. De manière similaire, certains lipides peuvent présenter le même genre de polymérisation en milieu oxique (e.g. Sinninghe Damsté et de Leeuw, 1990 ; Hedges et Keil, 1999 ; Versteegh et al., 2004). Ces réactions ont pour effet de limiter la dégradation du matériel organique d'origine marine comme terrestre, en diminuant ainsi l'action des bactéries. D'une manière plus générale la composition de la matière organique n'est pas sans effet sur les processus de dégradation même si les paramètres en jeu sont difficilement quantifiables.

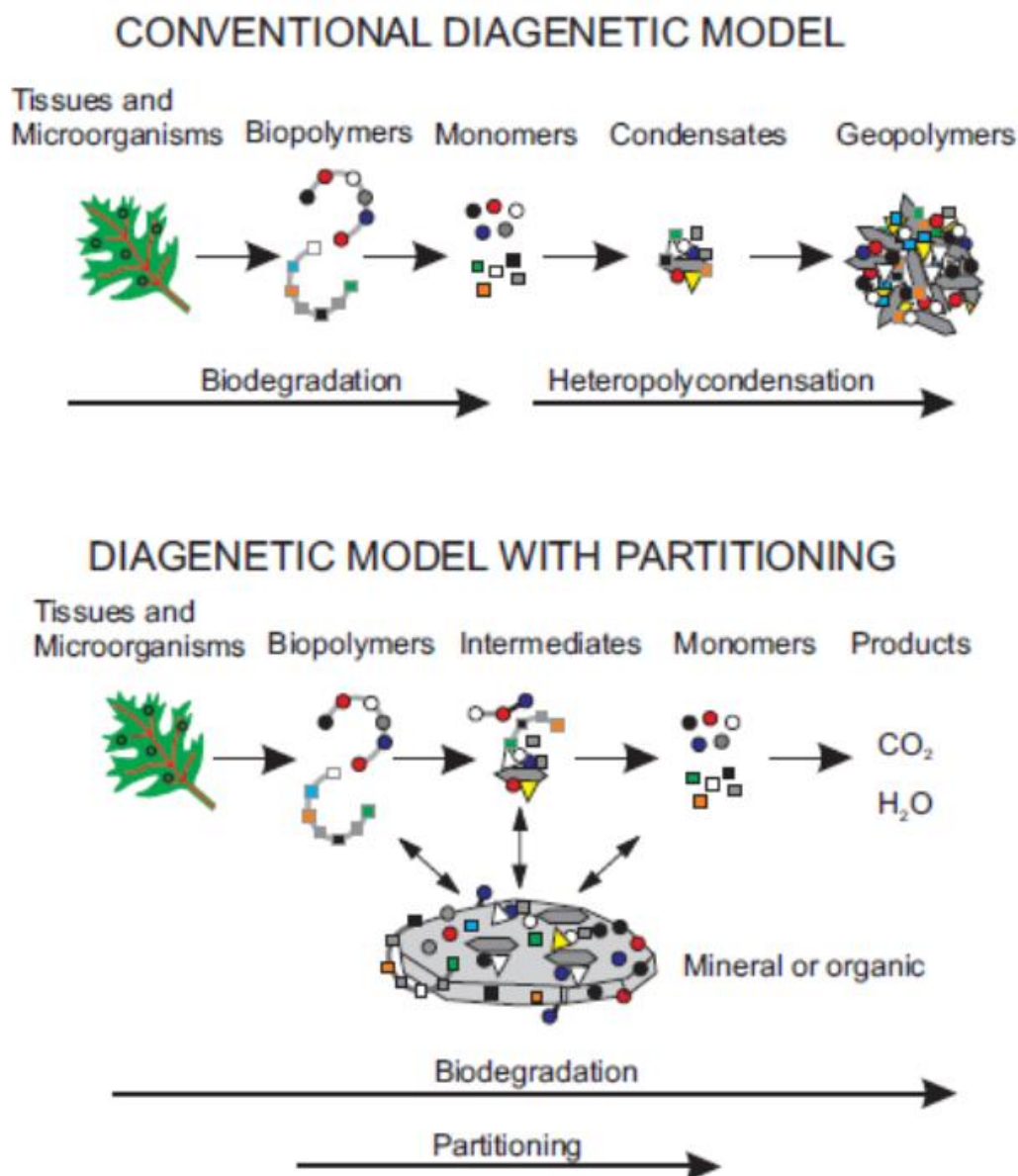


Fig. 9. Protection physique de la matière organique. Modèle conventionnel de biodégradation et repolymérisation (en haut) et modèle alternatif de biodégradation et absorption pour la diagenèse et la préservation de la matière organique (en bas) (modifié de [Hedges et Keil, 1999](#)).

.2.2 Niveau d'oxygène

Le deuxième facteur qui affecte fortement la préservation de la matière organique est la disponibilité en oxygène qui détermine le type de respiration des organismes benthiques. Les microorganismes anaérobies sont des dégradeurs de matière organique bien moins efficaces que la micro et macrofaune aérobies (e.g. [Bastviken et al., 2004](#)). De manière générale, la dégradation de la matière organique a lieu dans des conditions oxygènes. La présence de niveaux faibles en oxygène favorise donc la conservation. Cependant, certaines recherches ont mis en avant une dégradation augmentée dans le cas d'oscillations redox qui favorisent l'effet cumulé d'organismes aérobies et anaérobies ([Canfield, 1994](#) ; [Aller, 2001](#) ; [Aller et Blair, 2006](#)). A

l'échelle globale, la déplétion en oxygène n'est pas un état à l'équilibre, et la colonne d'eau est constamment réapprovisionnée par diffusion depuis l'atmosphère ou par les circulations océaniques. L'appauvrissement en oxygène peut-être relié à deux phénomènes : une consommation d'oxygène par respiration supérieure au taux de réapprovisionnement ou l'isolement d'une tranche d'eau des sources d'approvisionnement en oxygène.

Dans le cas d'apport massif de nutriments dans les zones d'upwelling ([Garrett, 1991](#)), la multiplication du phytoplancton entraîne la forte production de matière organique. La consommation d'oxygène augmente par la même occasion avec la dégradation par les organismes aérobies de cet afflux de matière organique. En cas de consommation supérieure au renouvellement d'oxygène, une Zone à Minimum d'Oxygène se développe (OMZ) (**Fig. 10**). Situés à des profondeurs d'eau de l'ordre de quelques centaines au millier de mètres, les sédiments en contact avec cette zone reçoivent un flux important de matière organique et développent des conditions réductrices propices à sa conservation. Le cas d'apport massif de nutriments depuis le continent entraînant des efflorescences algales peut également engendrer une forte réduction de la concentration en oxygène. La mise en place d'une OMZ pérenne est cependant beaucoup plus compliquée que dans le cas d'une cellule d'upwelling.

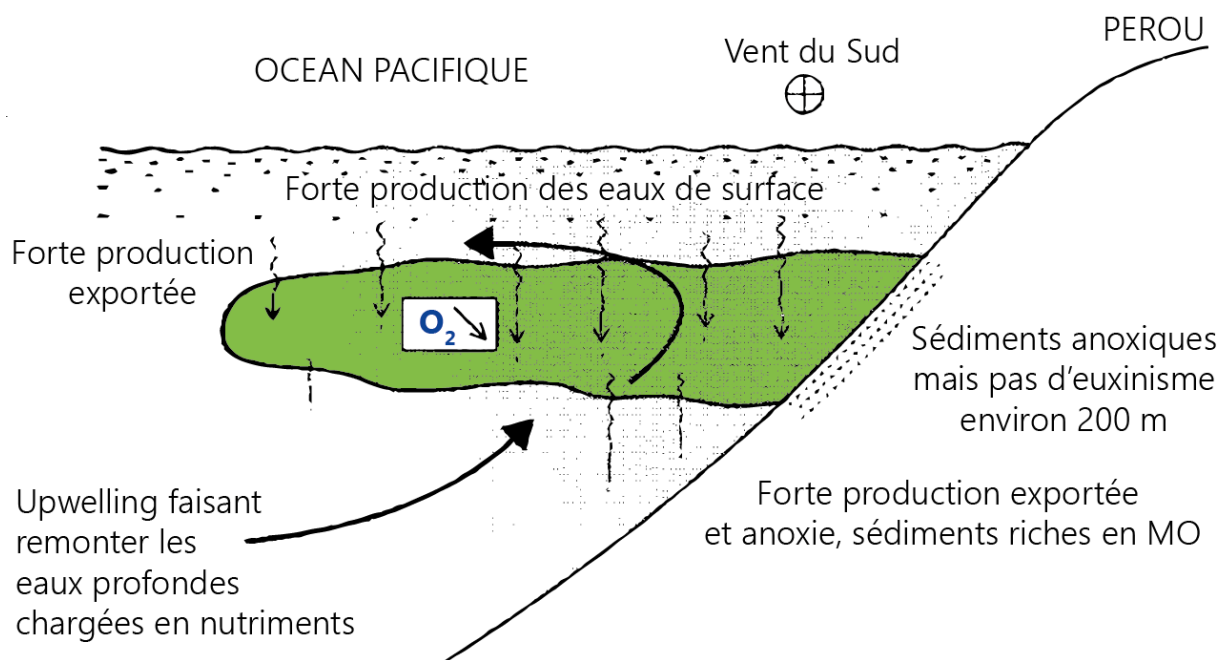


Fig. 10. Zone à Minimum d'Oxygène (OMZ, en verte) illustrée avec l'exemple du Pérou. (Modifié de [Baudin et al., 2007](#)).

Dans le cas de stratification de la colonne d'eau, la partie profonde peut potentiellement se trouver coupée de tout apport d'oxygène. Elle évolue alors progressivement vers un milieu anoxique. Cette différence de densité est liée à la différence de concentration en sel. Elle est entraînée soit par des apports massifs d'eau douce depuis le continent, soit par une importante évaporation qui entraîne la plongée des eaux enrichies en sel. Le corps d'eau moins dense, formé en surface, va isoler le corps plus profond, le coupant ainsi des apports en oxygène. On parle alors de stratification haline (**Fig. 11**). Ces conditions sont difficilement réunies dans le cas d'un océan ouvert où les grandes circulations liées notamment à la plongée en profondeur des eaux froides et riches en oxygène aux pôles entraînent un brassage de la colonne, un

renouvellement de l'oxygène en profondeur et la perte de stratification. Un domaine marin isolé et sans circulation profonde sera plus propice à la mise en place de ce processus. Cependant, la circulation thermohaline n'a pas toujours été active dans l'histoire de la Terre et des périodes d'anoxie globale ont déjà été référencées (Jenkyns, 2010).

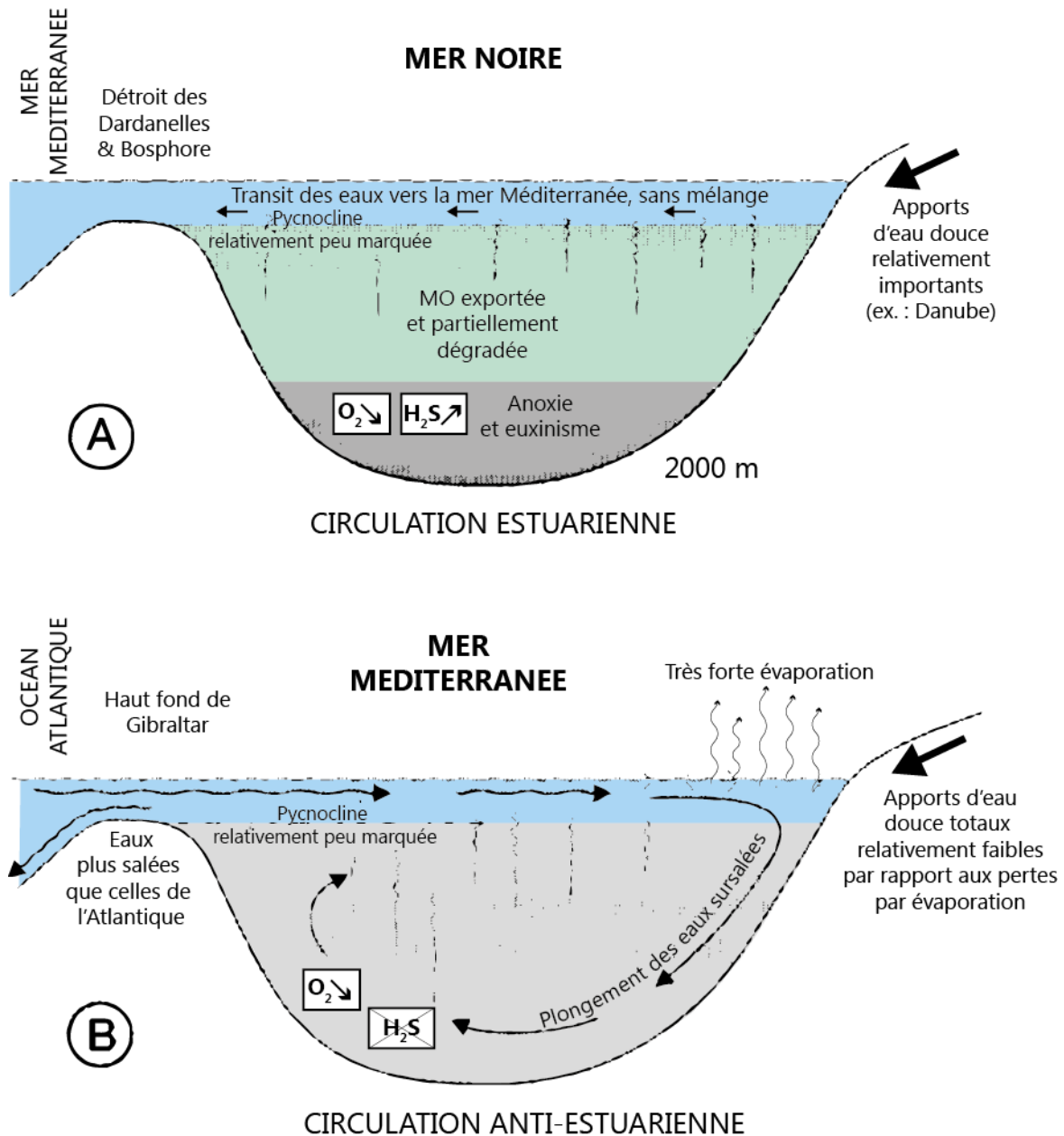


Fig. 11. Les effets du confinement des bassins sur l'oxygénation de leurs eaux. Dans le cas A, les apports d'eau vont des fleuves vers la mer Noire puis la mer Méditerranée. On parle de circulation estuarienne. Dans la configuration B, la forte évaporation des eaux du fait du climat méditerranéen provoque un déficit d'eau : l'évaporation excède les apports par les fleuves. Ce déficit est comblé par des entrées d'eaux atlantiques par le détroit de Gibraltar. On parle de circulation anti-estuarienne (Modifié de Baudin et al., 2007).

2.3 Taux de sédimentation

Deux facteurs entrent en jeu si l'on considère l'effet du taux de sédimentation sur la conservation de la matière organique : la dilution et l'enfouissement.

L'effet de dilution ne concerne pas directement la préservation du matériel organique, mais il est utile de préciser à ce stade que l'enregistrement du « signal organique » est très dépendant de la vitesse à laquelle se déposent les sédiments. Plus le taux de sédimentation non organique est élevé, plus la fraction organique est diluée et plus sa concentration est faible. De nombreuses études ont abordé ce sujet et mis en évidence l'influence de la dilution en contexte d'apport siliciclastique (Ibach, 1982 ; Stein, 1986), mais également carbonaté (Van Buchem et al., 2005). Les travaux de Tyson (2001, 2005) et de Arthur et Sageman (2005) semblent montrer que le phénomène de dilution peut-être ignoré jusqu'à un taux de sédimentation linéaire de l'ordre de 5 cm.k^{-1} pour lequel l'apport de matériel inorganique ne serait que le reflet d'une production biogénique (silice biogène, carbonate des tests du phytoplancton : « autodilution »). Dans cette plage de faibles valeurs, une augmentation du taux de sédimentation entraînerait même une meilleure préservation de la matière organique en permettant un enfouissement plus rapide de cette dernière et la rendant moins susceptible d'être exposée à un renouvellement des accepteurs d'électron (notamment diffusion des sulfates dans les environnements de fond anoxiques). Par contre, la dilution essentiellement associée à un apport détritique inorganique (allodilution) serait clairement effective au-delà d'un taux de sédimentation de 10 à 20 cm.k^{-1} . Ce phénomène de dilution peut être très important dans les environnements carbonatés dont les taux de sédimentation sont globalement élevés.

Le facteur dilution va diminuer le signal organique final, tandis que le facteur enfouissement va jouer en faveur de la conservation du flux de carbone arrivant en contact avec les sédiments du fond marin. Une fois atteint l'interface eau-sédiment et dans le cas général d'un milieu oxygéné, la durée d'exposition de la matière organique aux organismes dégradants est directement liée à la vitesse à laquelle elle est recouverte par d'autres sédiments.

D'autres paramètres viennent s'additionner à ces observations de premier ordre donnant une dimension complexe et multi-variable au taux de sédimentation (**Fig. 12**). La présence d'organismes benthiques fouisseurs, par exemple, aura un double effet : non seulement ils bénéficient directement de l'apport en carbone et en énergie contenue dans la matière organique, mais de plus, pour nombre d'entre eux, ils augmentent considérablement le temps de résidence de la matière organique dans un environnement favorable à la dégradation biologique par le biais du fouissage (bioturbation) (Wignall, 1994).

Les paramètres physiques de l'environnement de dépôt, comme la texture ou la température des sédiments, peuvent aussi avoir une influence directe sur le temps d'exposition à l'oxygène ou aux autres agents de dégradation comme les enzymes. Dans le cas d'un milieu anoxique, le facteur enfouissement devient moins important car la matière organique est moins dégradée par les organismes anaérobies ; un taux de sédimentation élevé n'impliquera donc pas nécessairement une meilleure conservation mais augmentera au contraire la dilution.

Le matériel organique enfoui dans le sédiment reste en partie métabolisable et peut faire l'objet d'une dégradation microbienne jusqu'à des profondeurs supérieures à 400 m et à des températures allant jusqu'à environ 130 °C (action de la biosphère profonde) (Wellsbury et al., 1997). Le carbone qui sera fossilisé et que l'on pourra considérer comme la valeur de TOC représentative de la roche mère que l'on souhaite modéliser sera de ce fait inférieure à celle correspondant à la matière organique fraîchement soustraite à la colonne d'eau.

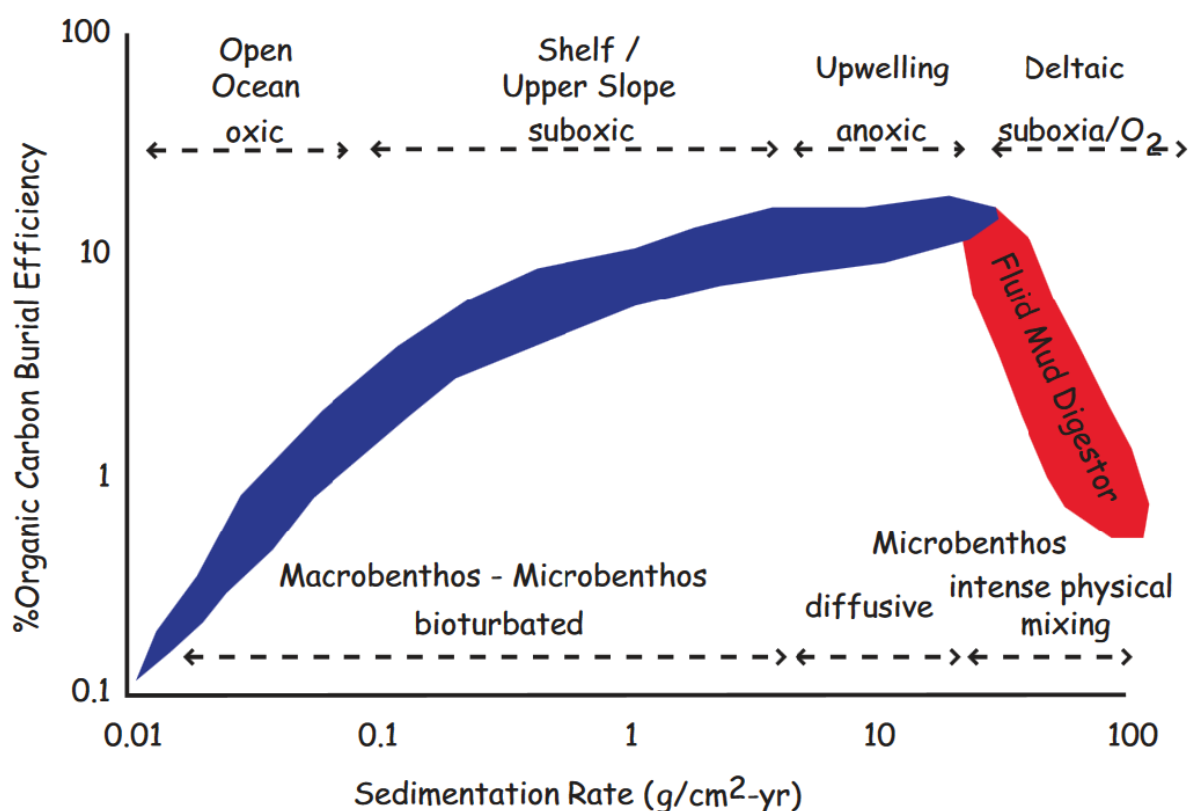


Fig. 12. Efficacité de l'enfouissement du carbone organique (pourcentage de carbone organique enfoui) en fonction du taux de sédimentation (Zonneveld et al., 2010). Ce schéma illustre la nature complexe et multi-variable des processus biologiques et physiques qui interviennent dans différentes conditions de sédimentation.

.3 Analyse de la matière organique

Dans cette partie, seules les méthodes utilisées dans cette thèse font l'objet d'un paragraphe détaillant la procédure de l'analyse de la matière organique et le type de résultats obtenus. Les méthodes analytiques employées dans les sources bibliographiques pour caractériser la matière organique font l'objet d'une revue rapide renvoyant aux publications de référence.

3.1 Pyrolyse Rock-Eval

La pyrolyse Rock-Eval est une méthode physico-chimique permettant une étude rapide du contenu organique des roches ([Espitalié et al., 1977, 1985](#)). Cette méthode a été conçue pour répondre aux besoins de l'exploration pétrolière, afin de fournir des informations à la fois sur le potentiel pétrolier des roches, sur leur quantité d'hydrocarbures libres, sur leur type de matière organique et sur l'état d'évolution de cette dernière. L'ensemble de ces données est acquis au cours d'un seul et même cycle d'analyse. La description proposée ici est celle de [Baudin et al. \(2007\)](#).

La méthode consiste à chauffer, sous courant de gaz inerte (azote), environ 60 mg de roche broyée. La pyrolyse débute par un isotherme de 300°C puis se poursuit jusqu'à 650°C avec une montée en température de 25°C.min⁻¹ (**Fig. 13**). A 300°C, les hydrocarbures libres, c'est-à-dire déjà présents dans la roche, sont volatilisés (pic S₁). Dans l'intervalle 300-650°C, les composés hydrocarbonés lourds (>C₄₀) sont volatilisés (pic S₂). La détection des produits libérés se fait par ionisation de la flamme. Le CO₂ et le CO issu du craquage du kérogène sont détectés (pics S₃). L'échantillon pyrolysé est ensuite introduit par un passeur automatique dans un four d'oxydation. Au cours de cette seconde phase d'analyse, l'échantillon est chauffé à de 300 à 850°C à raison de 30°C/min sous courant d'air. Le CO₂ et CO produits sont détectés comme précédemment (pics S₄ et S₅). Ils correspondent aux résidus carbonés de la pyrolyse mais aussi au craquage des carbonates, permettant ainsi de calculer le % de carbone minéral (MinC).

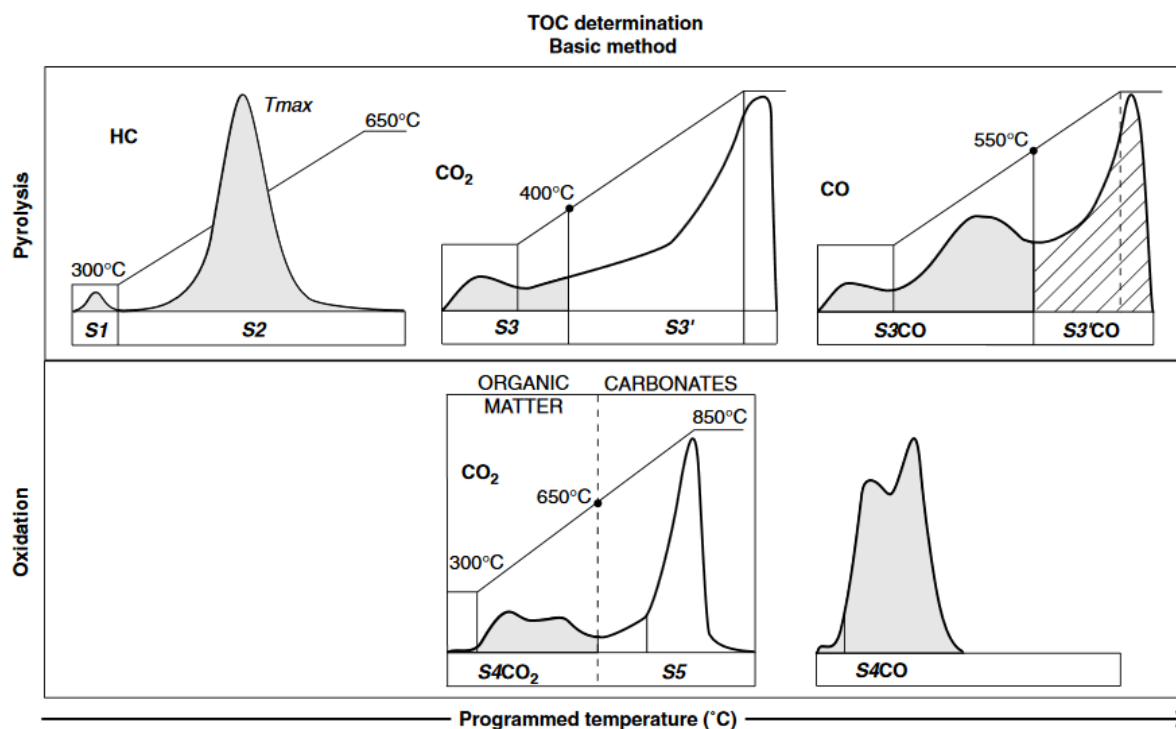


Fig. 13. Procédure analytique pour le calcul du TOC au Rock-Eval 6 et position des pics associés ([Behar et al., 2001](#)).

Ce cycle d'analyse, d'une durée de 45 min environ, fournit donc les paramètres suivants :

- La quantité d'hydrocarbures (gaz et huile) déjà présents dans la roche. Elle correspond au pic S_1 et est exprimée en mg.g^{-1} de roche ;
- La quantité de produits hydrocarbonés issus du craquage de kérogène. Elle correspond au pic S_2 et représente la quantité totale d'huile, c'est-à-dire des hydrocarbures et des composés polaires liquides, que le kérogène peut fournir sous l'influence d'une augmentation de température ;
- La quantité de CO_2 issu du craquage de la matière organique lors de la pyrolyse, pic S_3 , exprimée en $\text{mg CO}_2.\text{g}^{-1}$ de roche ;
- Le T_{max} est la température du four atteinte au sommet du pic S_2 , c'est-à-dire au moment du maximum de production des hydrocarbures. Ce paramètre est un indicateur de degré de maturation de la matière organique ; en effet, celle-ci est craquée à température d'autant plus haute qu'elle aura été portée à une température élevée au cours de son histoire géologique ;
- La teneur en carbone organique résiduel, mesuré par oxydation, correspondant au pic S_4 .

A partir de ces données, sont calculés :

- La teneur en carbone organique total (TOC), exprimée en pourcentage pondéral, de l'échantillon. C'est la somme du carbone pyrolysé et du carbone organique résiduel.
- Le potentiel pétrolier de la roche. C'est la somme $S_1 + S_2$ exprimé en milligrammes d'hydrocarbures (HC) par gramme de roche ou plus généralement en kg HC.t^{-1} de roche ;
- L'index d'hydrogène $\text{IH} = (S_2/\text{TOC}) \times 100$ en $(\text{mg HC.g}^{-1} \text{ TOC})$ qui a la même signification que le rapport H/C de la composition chimique élémentaire de la matière organique dans le diagramme de Van Krevelen ;
- L'index d'oxygène $\text{IO} = (S_3/\text{TOC}) \times 100$ (en $\text{mg CO}_2.\text{g}^{-1} \text{ TOC}$) comparable au rapport O/C du kérogène.

L'ensemble de ces paramètres permettent d'avoir une idée de l'histoire de la roche et de son enfouissement afin de savoir si une partie de la matière organique a pu être expulsée. Enfin, il s'agit de la méthode de référence afin de quantifier le contenu organique de la roche sous forme de TOC.

.3.2 Carbolog

La méthode Carbolog a été développée par l'IFP Energies Nouvelles afin d'estimer la matière organique contenue dans les roches-mères en utilisant les mesures issues des diagraphies de puits (Carpentier et al., 1991). Cette méthode repose sur les propriétés de la matière organique caractérisée par de fortes valeurs de sonic et de fortes valeurs de résistivité (**Fig. 14**). L'eau, la matière organique et les argiles présentent une augmentation du temps de transit des ondes. La résistivité permet de discriminer la fraction de ces composants dans un deuxième temps. En effet, l'eau et les argiles sont des composants conducteurs alors que la matière organique présente un comportement isolant.

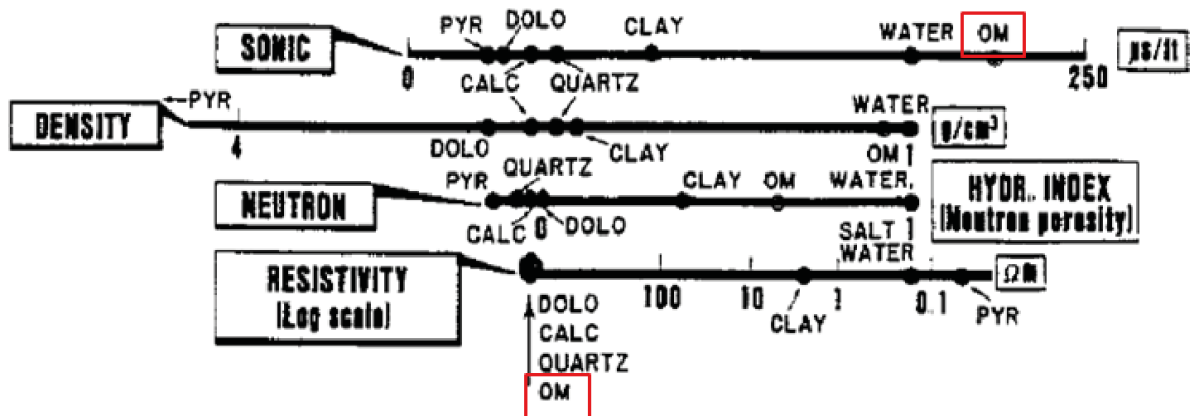


Fig. 14. Réponse des outils de logging aux différents composants contenus dans les roches, (d'après Carpentier et al., 1991). OM : Matière organique.

Dans la pratique, la méthode peut s'exprimer graphiquement à partir d'une ligne « 0% de TOC » construite en fonction du temps de parcours des ondes et de la résistivité d'un pôle « matrice » sans matière organique et un pôle « eau » (**Fig. 15**). Cette ligne est donc spécifique à chaque formation. Un point « 100% matière organique » estimé en fonction du type de matière organique permet par la suite de placer dans le même graphique un pôle théorique à 100% de TOC. Les mesures issues des diagaphies de puits sont par la suite plotées sur le graphique et s'échelonnent entre le pôle 0% et 100% de TOC en fonction de leur contenu organique. Les données de pyrolyse effectuées sur les échantillons de la formation permettent de calibrer la courbe de TOC obtenue par Carbolog sur les données mesurées.

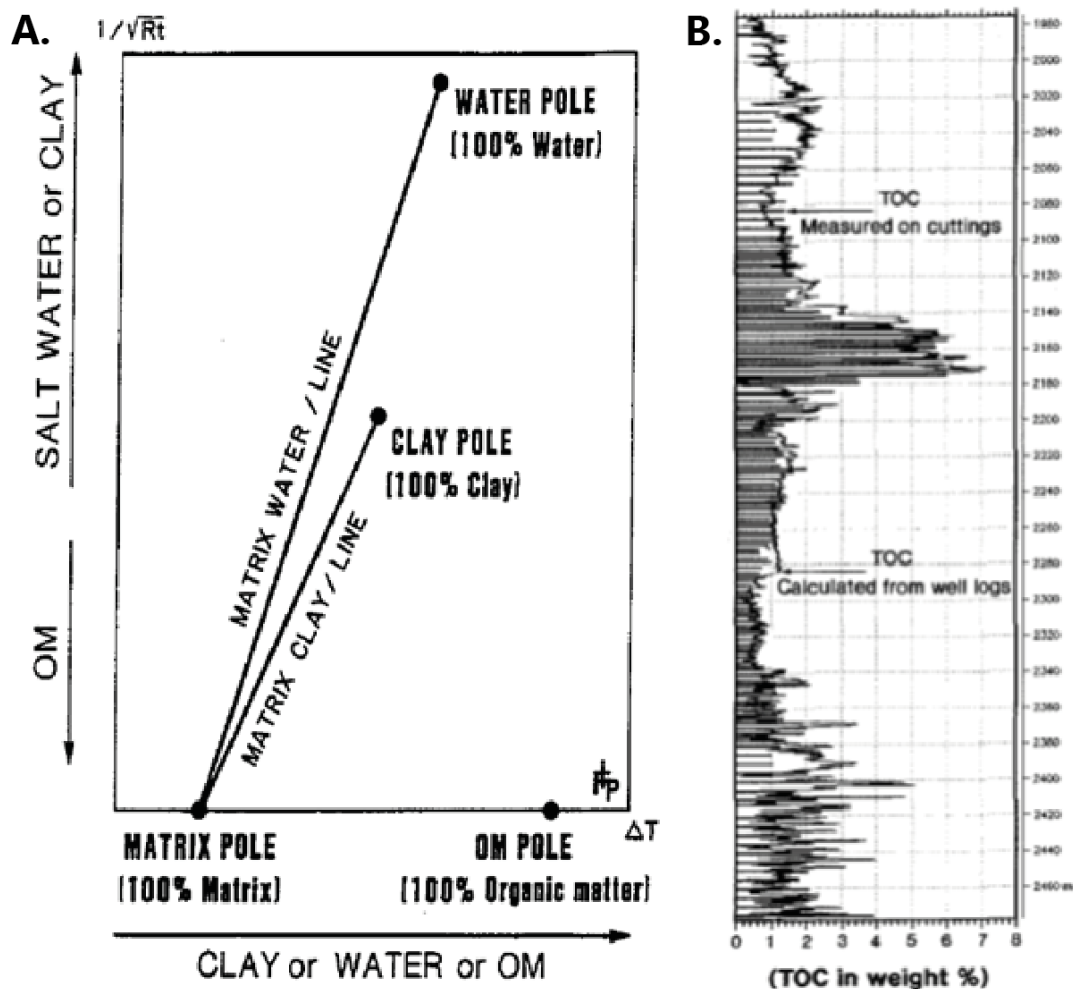


Fig. 15. A. Construction graphique de la méthode Carbolog. B. Extrait de courbe Carbolog construite à partir des données d'un puits du Jurassique inférieur du bassin de Paris. La courbe en noir est la courbe construite par Carbolog, les traits noirs indiquent les mesures obtenues par pyrolyse Rock-Eval (d'après [Carpentier et al., 1991](#)).

.3.3 Minéralogie

L'analyse par Diffraction des Rayons-X (DRX), permet de caractériser les différentes fractions minérales de la roche. Cette méthode ne concerne pas directement l'analyse de la matière organique. Elle permet cependant d'avoir une notion de la composition du bulk sans sa fraction amorphe et, une fois corrélée avec les mesures de TOC de pyrolyse Rock-Eval, de définir des faciès minéralogiques plus ou moins associés à la matière organique. Cette caractérisation minéralogique permet également de définir les faciès propices à la fracturation dans le cadre d'exploitation non conventionnelle des hydrocarbures.

Cette méthode consiste à envoyer des rayons-X sur un échantillon de roche broyée aplani sur une lame. Un détecteur permet ensuite de mesurer l'intensité et la direction du rayon réémis. Le caractère de cette diffraction est directement lié au type de minéral percuté par le rayon-X. Le résultat de l'analyse est obtenu sous forme d'un histogramme où un ou plusieurs pics sont

liés à une seule et même phase minérale. Un algorithme d'identification permet de discriminer les pics à partir de données de référence et de définir les minéraux présents.

Plusieurs méthodes de quantification relative ont été développées à partir du pic principal de chaque constituant minéralogique obtenu sur le diffractogramme : mesure de la taille ou mesure de la surface. Le calcul des pics principaux des différents constituants minéralogiques présents dans l'échantillon permet ainsi de donner une estimation de proportion relative.

L'analyse des échantillons broyés dans le cadre de cette thèse se fait à partir d'un diffractomètre à rayons-X Bruker D2 phaser équipé d'un détecteur LynxEye (radiation $\text{CuK}\alpha$, $\lambda=1.54\text{\AA}$ et filtre à Ni). L'analyse est effectuée de 2.5° à $75^\circ 2\theta$ (vitesse de $6^\circ 2\theta.\text{min}^{-1}$). L'identification des pics a été effectuée grâce au logiciel Macdiff afin de déterminer les phases minérales. Le logiciel permet également d'estimer l'intégrale de chaque pic afin de donner les proportions relatives de chaque minéral.

.3.4 Palynofacies

La majorité des méthodes d'analyse directement appliquées à la matière organique sont des méthodes dont les résultats permettent de déterminer l'origine du contenu organique. En effet, un des prérequis pour étudier les processus de conservation de la matière organique marine est de distinguer cette fraction du signal organique liée aux sources continentale.

Développée par [Combaz \(1964\)](#), la méthode des palynofaciès consiste à analyser en microscopie optique l'assemblage des particules de matière organique isolées de la roche sédimentaire suite à des attaques des phases minérales par de l'acide chlorhydrique (33 %) et à l'acide fluorhydrique (70 %). La distinction des différentes catégories des composants est basée sur leur structures, leur taille, leur couleur et sur l'estimation de leur proportion relative dans l'assemblage organique particulaire ([Combaz, 1980](#) ; [Tyson, 1995](#)) et permet d'estimer la provenance du matériel organique (terrestre ou marin).

La méthode et la classification utilisée sont d'avantage détaillées dans l'étude du forage de Couy-Sancerre (Sud du bassin de Paris) ([ANNEXES](#)).

.4 Modèles théoriques

L'objectif de la modélisation est d'assembler un certain nombre de concepts représentant de manière simplifiée un phénomène réel. La finalité étant de parvenir à comprendre ce phénomène et d'être capable de prédire son comportement. Dans le cas de modèles théoriques, le prototype proposé reprend les concepts connus afin de proposer une ou plusieurs hypothèses permettant d'expliquer le phénomène étudié. Dans le cas de la modélisation numérique, l'objectif est de proposer un prototype « concret » dans lequel les concepts connus et leurs interactions sont quantifiés. Les hypothèses proposées sont évaluées sur la base des équations utilisées pour simuler les concepts mis en jeux et sur les résultats quantifiés obtenus (et donc comparables aux cas réels). L'élaboration de modèles théoriques, afin d'esquisser un schéma

hypothétique, est donc nécessaire à la création d'un modèle numérique qui permet de donner une dimension quantifiable aux hypothèses testées.

.4.1 Modèles théoriques

.4.1.1 Cas standard

Le modèle théorique idéal de l'histoire de la matière organique reprendrait tous les processus et concepts explicités plus haut, et plus encore. Il n'est cependant pas possible de faire apparaître tous les cas de figure sur un schéma simple, d'autant que la plupart des paramètres varie dans le temps et l'espace. Les schémas proposés ici (**Fig. 16** et **Fig. 17**) reprennent le cas « standard » et général en nommant simplement les facteurs intervenant dans l'histoire de la matière organique. Il faut garder en mémoire la complexité et le caractère multi-variable de ces facteurs qui sont difficilement transposables sur une illustration.

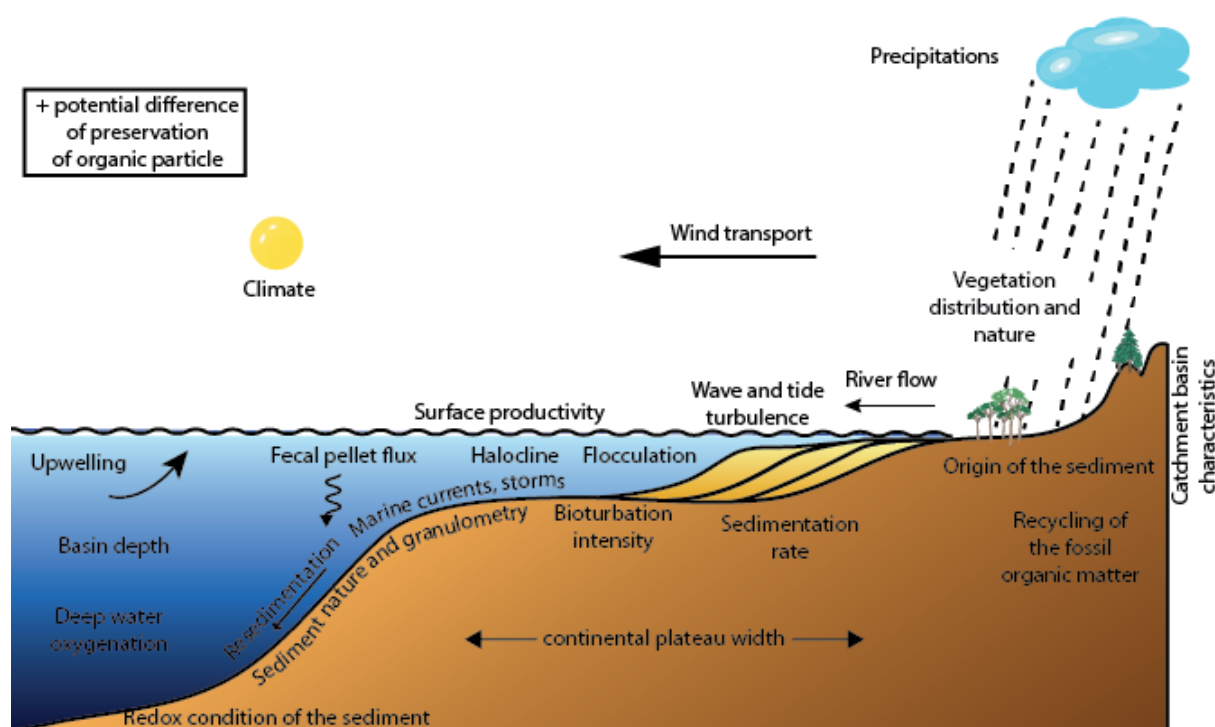


Fig. 16. Facteurs intervenant dans l'histoire et l'évolution de la matière organique (d'après Tyson, 1995).

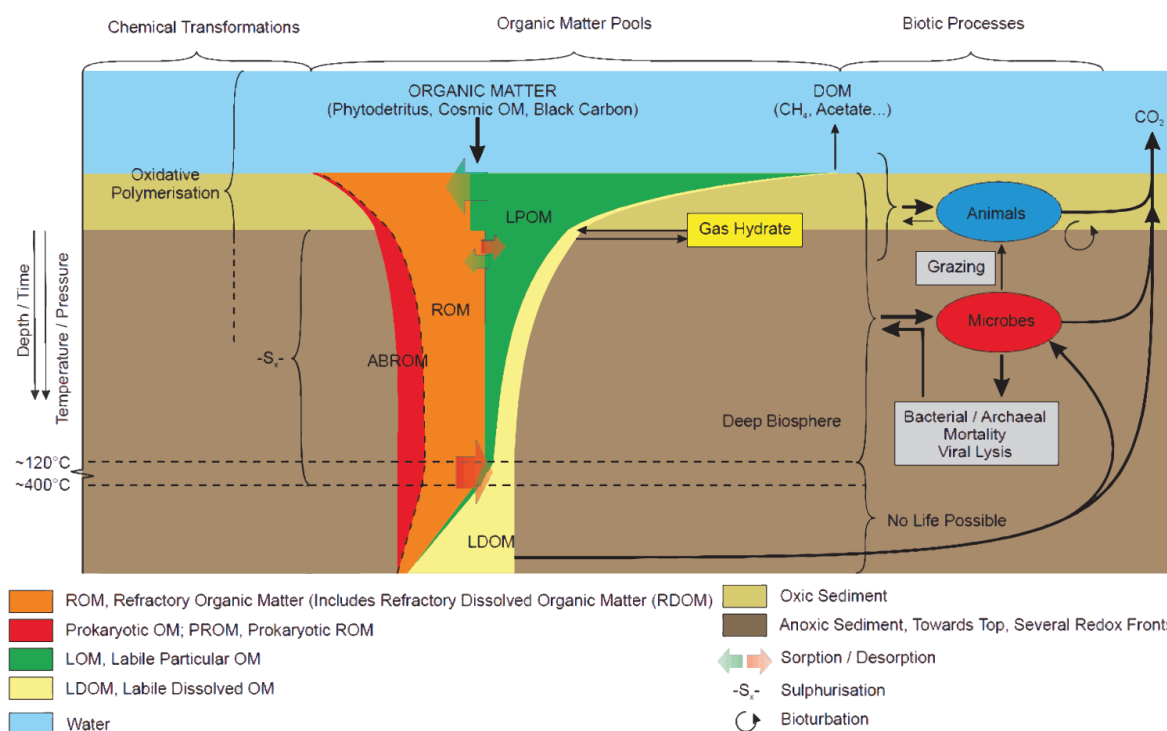


Fig. 17. Dégradation et transformation de la matière organique (OM) dans les sédiments. La partie gauche montre les processus de transformation chimique ; le centre montre la quantité relative de matière organique, les variations indiquées sont relatives et ne sont pas à l'échelle, la part de dégradation est largement sous-estimée ; la partie droite montre les processus biotiques (d'après [Zonneveld et al., 2010](#)).

Dans les faits, la majorité des modèles théoriques vise à proposer des hypothèses sur le cas spécifique de dépôts riches en TOC. Plus particulièrement, le cas des black shales du Toarcien inférieur avec les formations « Schistes cartons » en France, « Jet Rock » en Angleterre et « Posidonienschiefer » en Allemagne, fait l'objet de nombreux modèles conceptuels (e.g. [Hallam, 1967](#) ; [Hallam and Bradshaw, 1979](#) ; [Kauffman, 1981](#) ; [Jenkyns, 1985, 1988](#) ; [Jenkyns and Clayton, 1986, 1997](#) ; [Jenkyns et al., 2001](#) ; [Wignall, 1991, 1994](#) ; [Röhl and Schmid-Röhl, 2005](#)).

4.1.2 Les Schistes cartons

Le terme "Schistes carton", introduit par [Bleicher \(1883\)](#), désigne à la fois une formation mais aussi une lithologie. De nombreuses descriptions faciologiques et microfaciologiques en ont été faites (e.g. [Hanzo, 1978, 1979](#) ; [Goy, 1979](#) ; [Hollander et al., 1991](#) ; [Henrotay et al., 1998](#) ; [Röhl et al., 2001](#)). Il s'agit de marnes feuilletées sombres à plus ou moins fortes teneurs en carbone organique dont les principaux minéraux sont : les argiles, la calcite, le quartz et la pyrite. La terminologie schistes fait référence à la structure laminée de ces dépôts définissant des feuillets qui évoquent une schistosité. Mais ces dépôts en sondage sont systématiquement massifs. Seules les coupes ayant subi une altération lors de la mise à l'affleurement présentent ce débit caractéristique en minces feuillets rigidifiés, ressemblant à du carton. Ce sont des mécanismes d'altération par oxydation de la matière organique et de la pyrite qui provoquent

l'individualisation et le gonflement des feuillets principalement par la transformation de la pyrite en gypse.

4.1.3 L'Événement Anoxique Océanique du Toarcien inférieur, T-OAE

Les Evènements Anoxiques Océaniques (OAE) sont caractérisés par des dépôts riches en matière organique déposés de manière synchrone à une échelle globale. Les premières descriptions de ce phénomène ont été faites pour la limite Cénomano-Turonien dans le Crétacé (Schlanger et Jenkyns, 1976). Les horizons du Toarcien inférieur atteignent des valeurs élevées de TOC (jusqu'à 25%) partout dans l'Ouest de l'Europe et représentent la plus grande quantité de dépôts organiques du Méso-Cénozoïque. Les environnements de dépôts sont souvent identifiés comme étant euxiniques (Schouten et al., 2000 ; Pancost et al., 2004 ; Schwark et Frimmel, 2004). Des séries organiques sont également observables à cette période ailleurs dans le monde (Fig. 18). Sur la base de ces observations, Jenkyns (1988) a proposé un contexte anoxique mondial, le T-AOE.

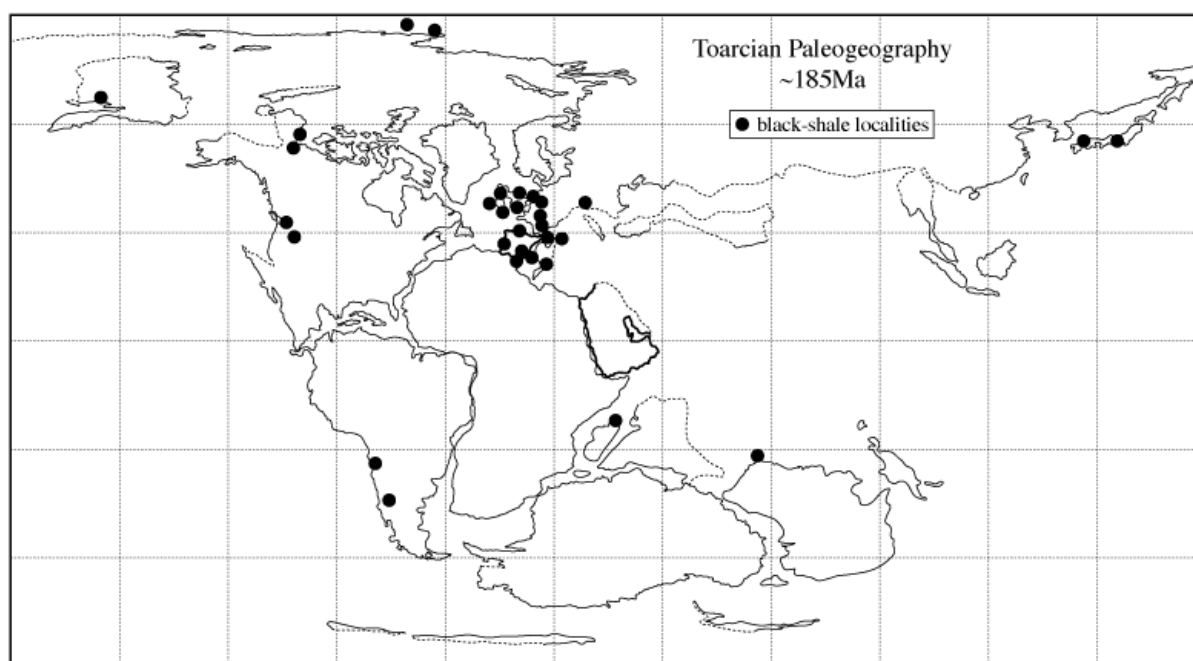


Fig. 18. Localisation des dépôts riches en matière organique connus au Toarcien inférieur (d'après Jenkyns et al., 2001).

L'OAE du Toarcien inférieur est initié de manière globale dans la zone à *Tenuicostatum* et plus précisément dans la sous-zone à *Elegantulum*¹. Différentes études proposent une durée de l'ordre de 500 ka à 650 ka (Jenkyns, 1988 ; McArthur et al., 2000 ; Bailey et al., 2003 ; Mattioli et al., 2004a ; Boulila et al., 2014). Les corrélations biostratigraphiques confirment ce synchronisme (Macchioni et Cecca, 2002 ; Mattioli et al., 2004a, 2004b) à l'échelle de l'Europe, bien que l'évènement ait été considéré pendant longtemps comme diachrone en raison des problèmes de nomenclature entre les domaines boréal et méditerranéen. Cependant, le diachronisme de la fin de l'évènement semble avéré (entre 100 à 200 ka), avec le décalage de

¹ Voir le Chapitre 2 pour la stratigraphie du Toarcien.

la fin des dépôts riches en matière organique (Baudin, 1989 ; Jenkyns et al., 2002 ; Mailliot et al., 2006 ; Hesselbo et al., 2007).

L'utilisation de la terminologie « OAE » pose cependant problème. Dans le cas du Toarcien inférieur d'Europe, les dépôts riches en matière organique sont déposés dans des bassins épicontinentaux et dans des zones d'accrétion marine océanique pour les quelques autres sites connus. Le terme « événement anoxique » sera utilisé pour le reste de ce rapport.

.4.1.4 Hypothèses

Malgré la globalité de l'évènement anoxique en Europe au Toarcien inférieur, la variabilité du contenu organique des sédiments peut s'avérer importante d'un bassin à l'autre (Baudin, 1989 ; Bassoulet et Baudin, 1994). Plusieurs modèles théoriques ont été proposés et avancent des hypothèses sur les facteurs locaux où globaux qui peuvent intervenir dans ce contexte anoxique, ou le renforcer. Ces modèles ont évolué avec le temps, intégrant progressivement des concepts et des hypothèses basés sur des études nouvelles. Deux types de modèles sont repris dans les débats actuels : ceux qui considèrent l'anoxie comme le processus à l'origine des dépôts riches en matière organique et qui apportent des hypothèses sur les mécanismes de mise en place de ce phénomène, et ceux qui suggèrent que l'augmentation de la production primaire est le moteur principal des fortes teneurs en matière organique.

Le modèle « silled-basin » proposé par Pompeckj (1901), est inspiré de la Mer Noire actuelle (Fig. 11 et Fig. 19-A). Ce modèle met en avant des conditions anoxiques développées grâce à une circulation des eaux limitée en raison de barrières topographiques et d'un apport d'eau douce important contribuant à la stratification des eaux. Le concept de topographie irrégulière dans le fond des bassins contribuant à isoler des dépressions d'apports en oxygènes fait son apparition plus tard avec le modèle « irregular bottom topography » (Hallam et Bradshaw, 1979) (Fig. 19-B). Le modèle « expanding bubble » ou « transgressive Black shale » (Wignall, 1991), reprend l'idée d'une anoxie développée dans le fond des bassins mais suggère une propagation de cette anoxie en période transgressive (Fig. 19-C et Fig. 20). Ce modèle va dans le sens d'une sédimentation différée des faciès organiques dans les parties les moins profondes. Les modèles les plus récents reprennent ces hypothèses en les combinant ou en les écartant. Röhl et Schmid-Röhl (2005) proposent par exemple un modèle où l'anoxie se développe en période régressive dès la fin du Pliensbachien en invoquant à la fois un bassin sillé et une topographie de fond importante (Fig. 21). L'anoxie est ensuite conservée dans le corps d'eau le plus profond et non alimenté en oxygène, jusqu'à ce que les seuils fermant le bassin soient ouverts.

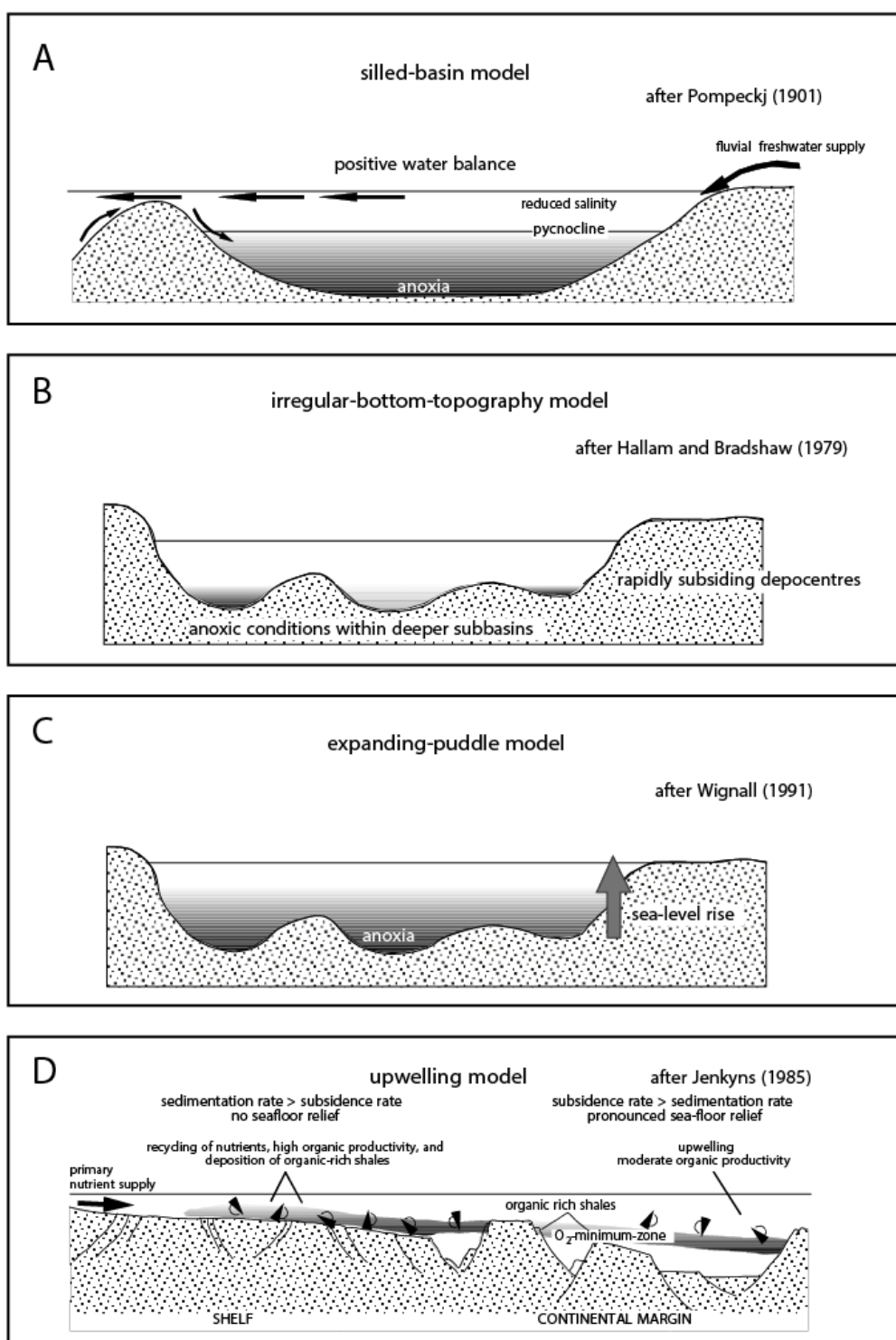


Fig. 19. Modèles conceptuels simplifiés proposés dans la littérature. A. Le modèle « silled-basin » permet la mise en place d’une stratification de la colonne d’eau et du développement de l’anoxie grâce à la présence d’un seuil comme dans le cas de la mer Noire. B. Le modèle « irregular bottom topography » propose un développement de l’anoxie dans les parties profondes et confinées du bassin. C. Le modèle « expanding puddle » reprend le concept du modèle « irregular bottom topography » en suggérant une propagation du niveau anoxique pendant les périodes de transgression. D. Dans le modèle à « upwelling » l’anoxie est initiée à la suite d’une forte productivité primaire sous la forme d’une OMZ (d’après Röhl et Schmid-Röhl, 2005).

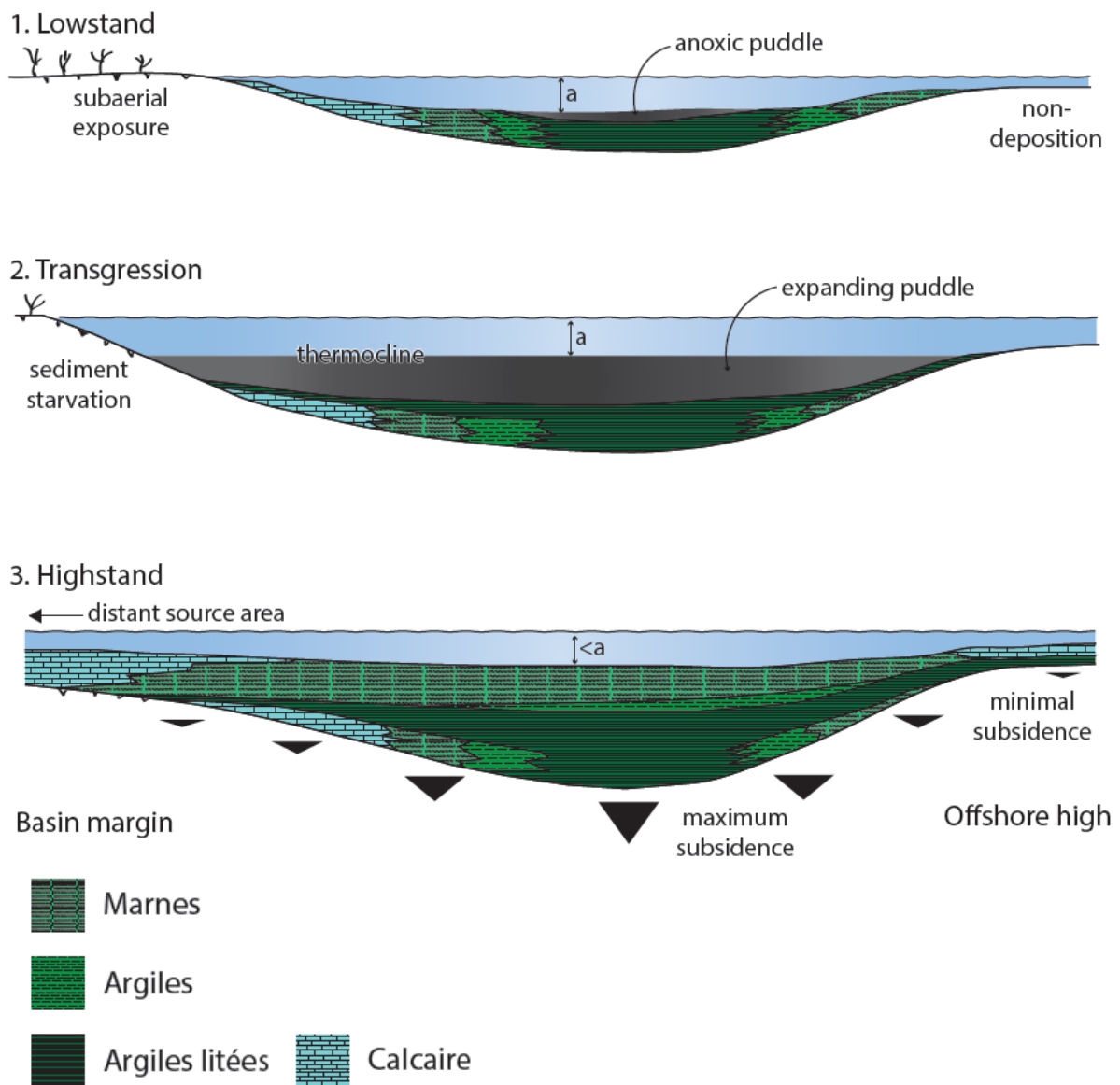


Fig. 20. Modèle à « expanding puddle ». Le moteur de ce modèle est la mise en place d'un niveau anoxique profond dans les parties confinées et déconnectées de l'apport d'oxygène du bassin (1). Ce niveau s'étend en période transgressive (2) et permet une forte préservation de la MO. L'oxygène est renouvelé (3) lorsque la profondeur du bassin repasse sous la zone d'action des vagues (a) (d'après Wignall, 1991).

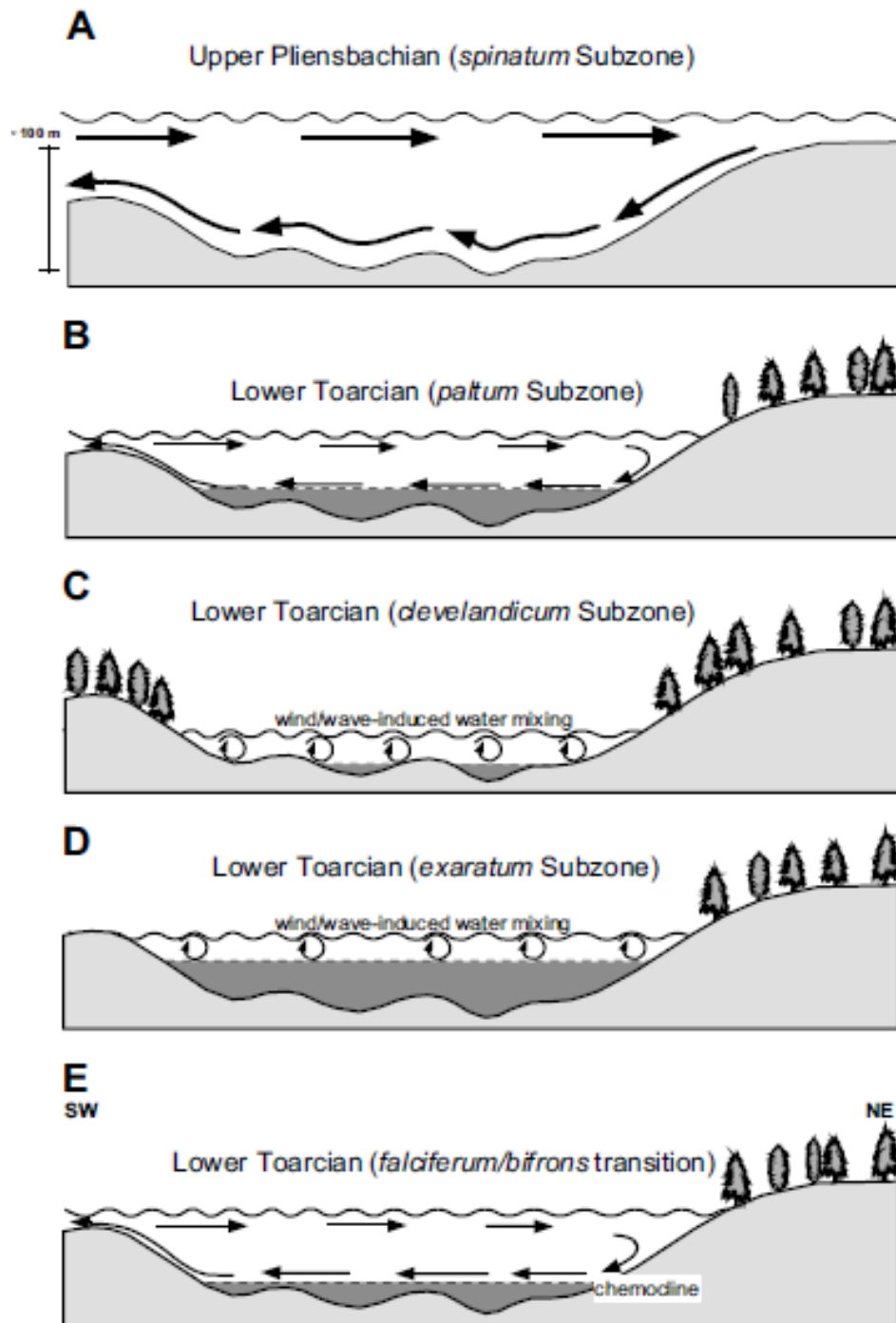


Fig. 21. Modèle couplant plusieurs concepts théoriques dans le cas des *Posidonia shales* allemands. A. Au Pliensbachien le bassin est suffisamment ouvert et présente un niveau d'oxygénation normal. B. Au Toarcien inférieur, la topographie de fond et l'aspect confiné permettent la mise en place d'un niveau anoxique. C. La chute du niveau marin permet de réoxygéner la colonne d'eau à l'exception des parties les plus profondes toujours isolées de la zone d'action des vagues. D. La transgression suivante entraîne la propagation de l'anoxie en gardant le corps d'eau profond déconnecté des apports en oxygène. F. La transgression se poursuit et entraîne l'ouverture du seuil. Le bassin est progressivement réoxygéné, seules les parties confinées profondes conservent l'environnement anoxique (d'après Röhl et Schmid-Röhl, 2005).

D'autres auteurs proposent que les dépôts riches en matière organique de cette époque résultent d'une forte productivité primaire (Küspert, 1982). Cette notion d'upwelling pendant la période transgressive du Toarcien a été reprise dans de nombreuses études (Fleet et al., 1987 ; Jenkyns and Clayton, 1986 ; Jenkyns et al., 2001) (Fig. 10 et Fig. 19-D). Dans ce modèle, le contexte climatique favorable de l'époque se traduit par des températures élevées, une accélération du cycle hydrologique, une accélération du lessivage continental (Jones et Jenkyns, 2001 ; Bailey et al., 2003 ; Cohen et al., 2004) et par la mise en place de cellules d'upwelling et de forts apports de nutriments (Jenkyns, 2003 ; Erba, 2004). La forte production primaire associée permet l'expansion de la zone à minimum d'oxygène et entraîne la propagation de l'anoxie (Jenkyns et al., 2002 ; Van de Shootbrugge et al., 2005a ; Wignall et al., 2006 ; McArthur, 2007). La diversification du nannoplancton calcaire à cette époque est un argument supplémentaire en faveur de ce modèle (Roth, 1987 ; Mattioli et Erba, 1999 ; Bown et al., 2004 ; Erba, 2006).

.4.2 Modèles numériques

Les modèles théoriques proposés actuellement mettent en avant un certain nombre d'hypothèses basées sur notre compréhension des processus mis en jeu et sur l'étude des cas modernes. Cependant la contribution exacte de chacun de ces facteurs reste encore mal établie. L'outil informatique permet d'apporter une dimension quantitative à ces modèles conceptuels au travers des simulations numériques.

Plusieurs études publiées tentent de prédire la répartition de la matière organique en simulant les processus décrits précédemment et en se basant sur les hypothèses propres à l'histoire de chaque bassin. Les premiers modèles numériques orientés sur la simulation des processus plutôt que sur une construction stochastique pour recréer le signal organique datent des années 90 (e.g. Tetzlaff, 1989 ; Carpentier et al., 1993 ; Steckler et al., 1996 ; Nordlund, 1996 ; Syvitski et Hutton, 2001 ; Warrlich et al., 2001 ; Mann et Zweigel, 2002, 2008).

Actuellement, aucun modèle numérique testant les hypothèses proposées dans la littérature pour justifier la répartition et les hétérogénéités des dépôts riches en matière organique, n'a été publié pour le Jurassique inférieur européen.

Conclusion

Les processus à l'origine des dépôts riches en matière organique ont fait l'objet de nombreuses études ces 30 dernières années. Cependant, le débat sur le rôle relatif des processus dans la mise en place de dépôts à fort TOC est toujours en cours. La contribution des processus en faveur d'une productivité primaire élevée et ceux en faveur de l'augmentation de la conservation de la matière organique, est une question d'actualité. La nature complexe et multi-variable de tous les paramètres en jeu rend la détermination des facteurs clés compliquée. La quantification et la hiérarchisation des processus est aujourd'hui un enjeu capital dans cette thématique.

Les nombreux modèles théoriques proposés pour les dépôts de Schiste cartons et leur équivalent en Europe proposent des hypothèses sur l'histoire de la matière organique. En comparaison avec le Toarcien, les autres étages du Jurassique inférieur sont peu étudiés malgré la présence de plusieurs niveaux de roches mères. Leur qualité et leur épaisseur sont cependant moins remarquables que celles des Schistes cartons et leur répartition est moins globale.

Dans le cadre de la modélisation numérique ces niveaux présentent pourtant un intérêt capital. A partir de leur caractérisation précise et du contexte stratigraphique, les modalités de leur formation peuvent être testées numériquement et comparées en fonction de l'âge et du bassin. Cette méthode permet d'identifier les facteurs clés et d'apporter une quantification relative des processus. Les hypothèses de cas spécifiques comme celui du Toarcien inférieur peuvent ainsi être testées, comparées et discutées.

Cette méthode nécessite un cadre chronologique et lithologique bien défini. Le chapitre suivant propose une synthèse bibliographique du Jurassique inférieur en Europe.

CHAPITRE 2 – LE JURASSIQUE INFERIEUR D’EUROPE

Introduction

Ce chapitre présente la synthèse bibliographique du Jurassique inférieur articulée en deux grandes parties : la première partie propose une revue de l'état de l'art sur le Jurassique inférieur en Europe ; la deuxième partie tente de donner au lecteur une vision globale de l'évolution des environnements de dépôt, des faciès sédimentaires associés et des roches mères en reprenant étage par étage les changements du domaine européen. Enfin la conclusion de ce chapitre tente en quelques lignes et de manière extrêmement synthétique de résumer les 27 Ma du Jurassique inférieur en Europe.

.1 Contexte géologique et état de l'art

.1.1 Le Jurassique inférieur

La période du Lias est la dénomination commune de la série inférieure du Jurassique, qui fait suite au Trias supérieur (Carnien / Norien / Rhétien), et qui précède le Jurassique moyen. Jusqu'aux années 1960, le Rhétien était rattaché au Lias. La commission internationale de stratigraphie a récemment préconisé l'appellation Jurassique inférieur (Lower Jurassic) pour le Lias.

Le Jurassique inférieur est l'époque s'étalant d'environ 201,3 à 174,1 millions d'années selon les dernières estimations radiométriques en vigueur.

Les quatre subdivisions chrono-stratigraphiques du Jurassique inférieur sont par ordre d'âge décroissant : l'Hettangien ($201,3 \pm 0,2 - 199,3 \pm 0,3$ Ma), le Sinémurien ($199,3 \pm 0,3 - 190,8 \pm 1,0$ Ma), le Pliensbachien ($190,8 \pm 1,0 - 182,7 \pm 0,7$ Ma) et le Toarcien ($182,7 \pm 0,7 - 174,1 \pm 0,1$ Ma). Ces âges sont ceux proposés par la Charte Chronostratigraphique Internationale (version 2015/01). Ces différents étages sont abordés avec plus de détails dans la partie suivante.

A la fin du Paléozoïque, l'ensemble des continents est regroupé dans la Pangée, entourée de l'océan Panthalassa. Dès le Trias, la Pangée se fracture. L'océan téthysien s'ouvre d'Est en Ouest, et sépare le Gondwana, au Sud, de la Laurasia, au Nord. Cette séparation ne sera complète qu'à la fin du Jurassique.

A la fin du Trias, l'Europe occidentale est localisée entre 20 et 40° de latitude nord à l'extrémité ouest de l'Océan Téthys en cours d'ouverture. Les dépôts sédimentaires sont alors peu profonds. Les faciès vont perdre leur aspect confiné et les environnements de dépôt vont s'approfondir progressivement tout au long de l'époque transgressive du Jurassique inférieur (**Fig. 22**).

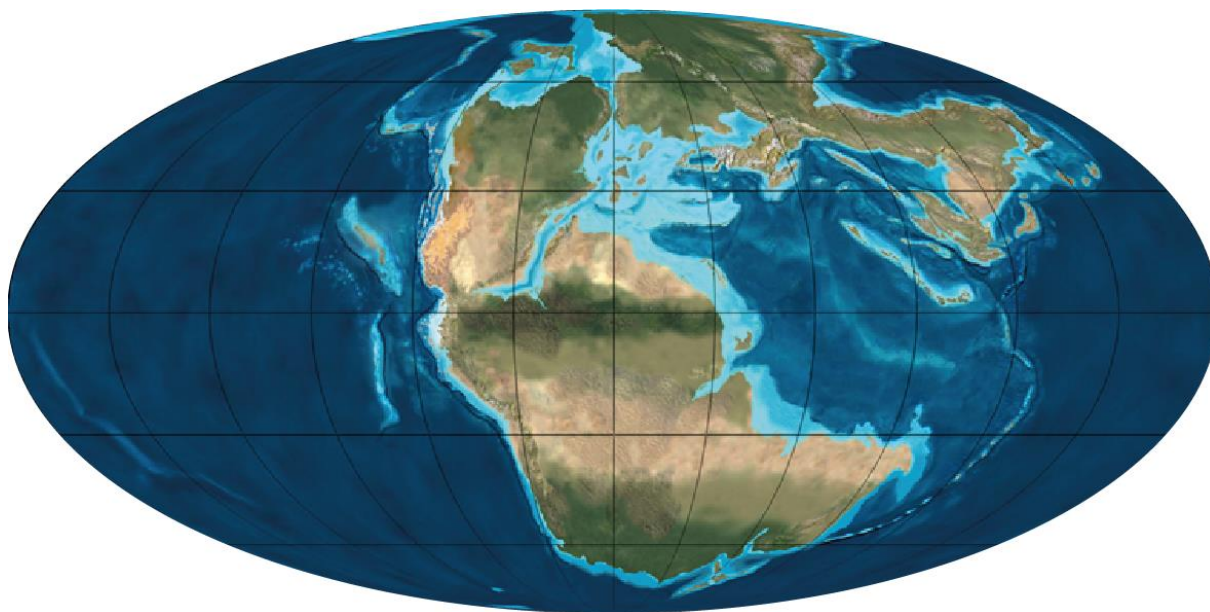


Fig. 22. Carte Paléogéographique du monde au Jurassique inférieur (d'après [Scotese, 2001](#)).

.1.2 Contexte géodynamique

La position charnière de l'Europe dans l'ouverture de la Téthys va entraîner sa structuration, des horsts et des grabens vont clairement délimiter les zones subsidentes des bassins et les zones de haut fonds ou de terres émergées ([Bernoulli et Jenkyns, 1974](#) ; [Bassoulet et Baudin, 1994](#) ; [Dromart et al., 1996](#)). Cette structuration liée à une tectonique extensive présente des effets locaux parfois importants ([Wilson et al., 1989](#) ; [Kullberg et al., 2001](#)).

.1.3 Paléogéographie

Le domaine européen situé dans l'ouest téthysien correspond à un domaine marin peu profond et subdivisé en micro-bassins individualisés les uns des autres par des hauts-fonds et des terres émergées. Cette vaste surface épicontinentale contraste avec un domaine plus profond et ouvert sur la Téthys à l'Est. Ces deux domaines sont fondamentalement différents par la profondeur de la tranche d'eau, les courants, les conditions de dépôts ainsi que le contenu paléontologique des séries. Le domaine européen communique au Nord avec le domaine boréal par l'intermédiaire d'un large corridor dont l'ouverture semble avérée au Toarcien ([Bjerrum et al., 2001](#)). Ce corridor peut expliquer le passage de faunes d'affinité boréale vers le domaine téthysien, mais également a pu permettre la circulation d'eau douce avec la fonte de glace au pôle ([Van de Shootbrugge et al., 2005b](#)). À cette époque, l'ouverture de l'Océan Atlantique Central permet la communication entre les eaux de la Téthys occidentale et celles du Proto-Atlantique. Ceci est également attesté par un mélange de faunes d'affinité téthysienne et pacifique dès le Plienbaschien terminal.

1.4 Volcanisme

La mise en place de la dorsale médio-Atlantique et l'ouverture du Proto-Atlantique surviennent entre -187 et -184 Ma (Pálffy et Smith, 2000) (Fig. 23).

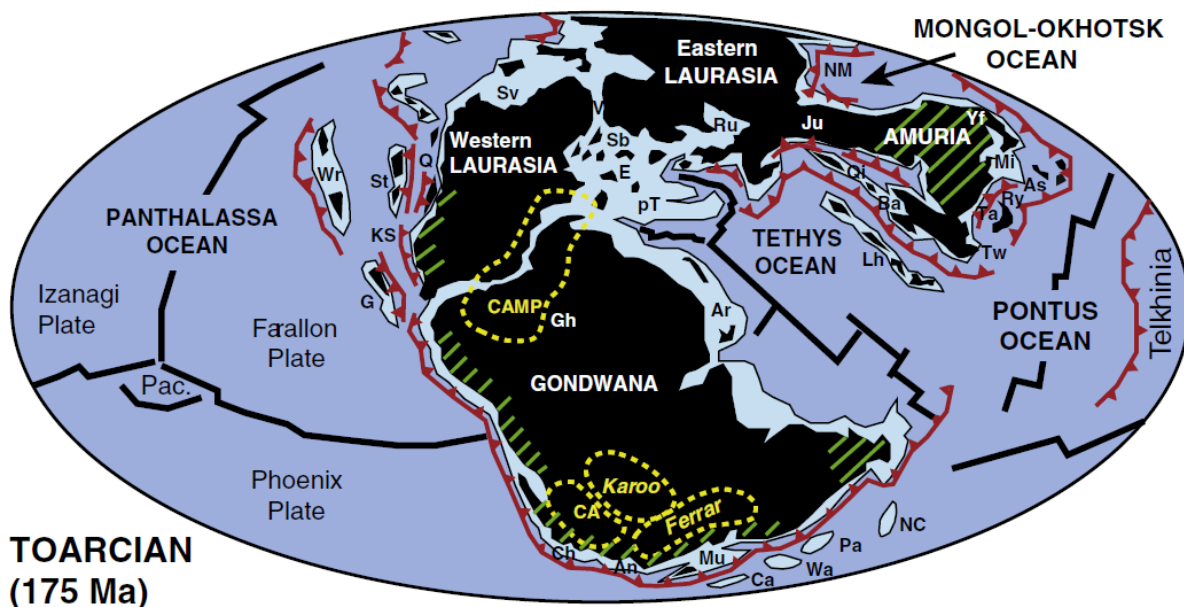


Fig. 23. Carte paléogéographique au Toarcien. Les zones jaunes indiquent les principales provinces volcaniques géantes de l'époque (d'après Dera et al., 2015). CA : Chon Aike.

À cette période, les rapports isotopiques du strontium (Jones et Jenkyns, 2001 ; Cohen et al., 2004) montrent de fortes valeurs dues à l'activité hydrothermale océanique et au volcanisme intense qui conduisent à la libération de grandes quantités d'isotopes juvéniles ^{87}Sr . Le rapport $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ baisse ensuite au cours du Jurassique inférieur jusqu'à des valeurs minimales à la limite Plienbachien - Toarcien. La propagation au Sud de ce rifting continental provoque ensuite l'éclatement du Gondwana il y a environ 183 Ma qui aboutit à la séparation des masses continentales africaine et antarctique. Au cours du Toarcien inférieur, une seconde province ignée géante se met en place (Duncan et al., 1997 ; Pálffy et al., 1997) dans les provinces de Karoo, Afrique du Sud et de Ferrar, Antarctique. Le maximum d'activité volcanique est daté à 183 ± 2 Ma par la méthode U/Pb (Pálffy et Smith, 2000) (voir paragraphe suivant pour l'évolution des températures).

Les rapports isotopiques du strontium de l'eau de mer augmentent ensuite jusqu'à la limite Aalénien - Bajocien, mais de façon plus prononcée au cours du Toarcien inférieur du fait de l'activité volcanique des provinces du Karoo et Ferrar. Il s'agit de la plus forte augmentation du rapport isotopique du strontium enregistrée durant le Phanérozoïque. Une excursion isotopique négative du $\delta^{13}\text{C}$ a lieu au Toarcien inférieur (zone à *Serpentinum*) (e.g. Hesselbo et al., 2000). Les données isotopiques indiquent un retour à l'équilibre au Toarcien moyen (Fig. 24). Cette excursion serait liée à l'activité volcanique des provinces ignées Karoo-Ferrar et/ou aux relargage massif de méthane par la déstabilisation de clathrates (Hesselbo et al., 2000).

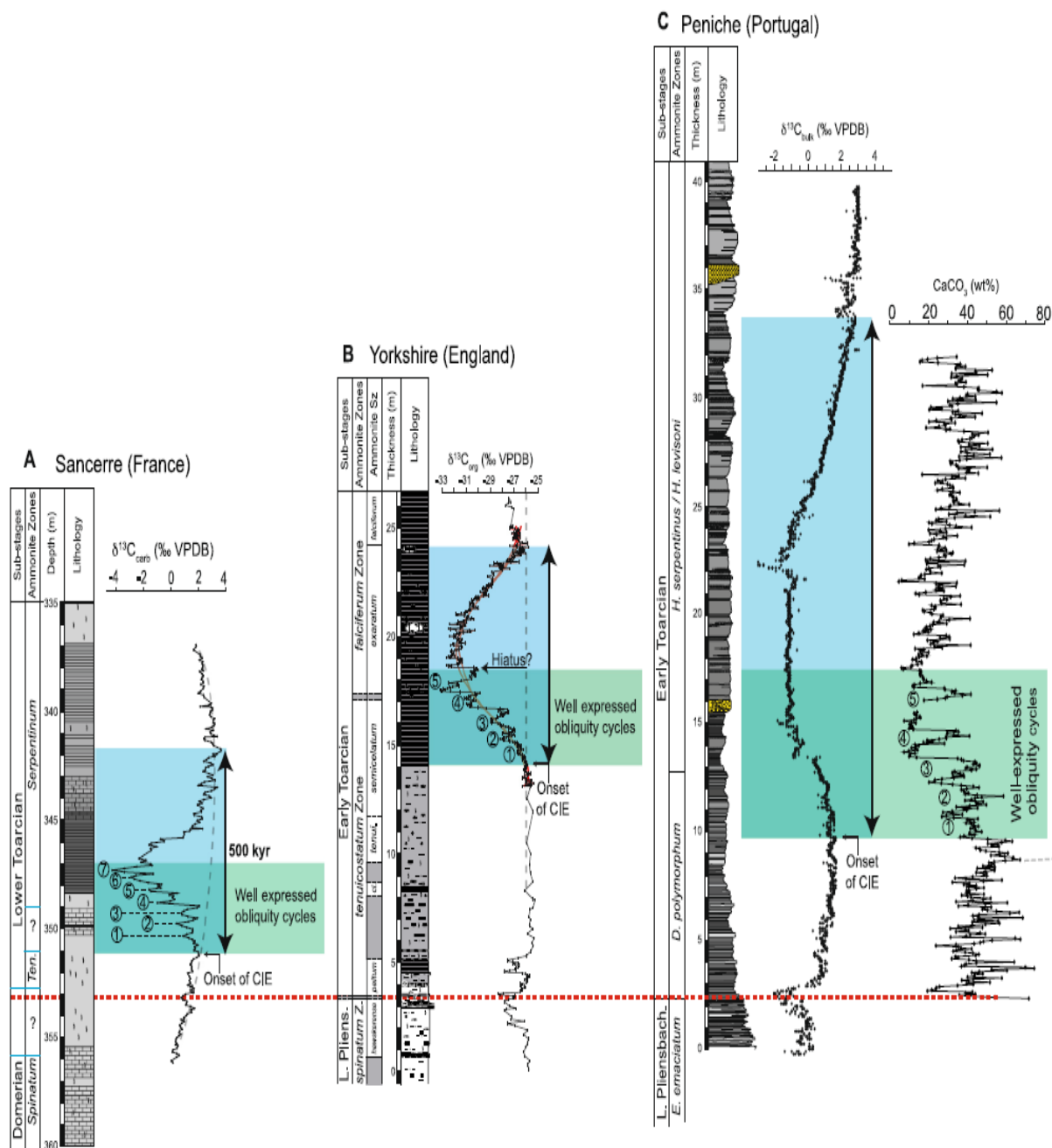


Fig. 24. Corrélations de l'excursion isotopique négative du $\delta^{13}C$ au Toarcien inférieur (d'après Boulila et al., 2014).

De nombreuses études font le lien entre la crise biologique majeure de la limite Trias – Jurassique et les émissions basaltiques aériennes du secteur médio-Atlantique (e.g. Lethiers, 1998 ; Harries et Little, 1999 ; Pálffy and Smith, 2000). Le relargage massif de méthane par les anciennes coulées volcaniques aurait considérablement bouleversé les faunes et les flores marines et continentales. Certains travaux mettent en avant le caractère répétitif de l'activité de ces provinces ignées géantes et la systématique association à des périodes de crise biologique (e.g. Courtillot and Renne, 2003).

1.5 Paléoclimat

L'époque du Jurassique inférieur est connue comme un intervalle chaud et humide où l'effet de serre est important (greenhouse) (Parrish et Curtis, 1982 ; Price, 1999). L'érosion continentale associée est importante entraînant une sédimentation marneuse généralisée à l'échelle du domaine ouest téthysien (Hesselbo et al., 2007). Les températures des eaux de surfaces du Toarcien sont estimées à près de 26°C dans cette région peu profonde (Chandler et al., 1992 ; Ziegler et al., 1993 ; Bjerrum et al., 2001). Les études palynologiques et des biomarqueurs des végétaux continentaux indiquent un couvert végétal important (Van Aarssen et al., 2000), constitué de végétaux de milieux relativement chauds (Vakhrameyev, 1982), ainsi qu'un réchauffement important à l'échelle globale dès la fin du Pliensbachien (Wang et al., 2005). Ce réchauffement rapide suivi d'un refroidissement est attribué à l'activité volcanique intense de cette époque qui entraîne une augmentation considérable de la $p\text{CO}_2$ atmosphérique estimée dans certaines études jusqu'à dix fois supérieure à celle actuelle (Berner, 1991 ; Cerling, 1991 ; McElwain et Chaloner, 1996).

Cette vision d'un Jurassique au climat chaud et humide avec un faible gradient latitudinal a souvent été remise en question. Des études suggèrent la présence de glaces aux pôles malgré les températures élevées sous les 40°N de latitude (Morard et al., 2003), sans pour autant que les deux observations soient forcément incompatibles (Price, 1999 ; Bjerrum et al., 2001). Les variations de $\delta^{18}\text{O}$ permettent potentiellement d'avoir des informations supplémentaires sur l'évolution des paléo-températures. Mais l'identification et la caractérisation des processus entraînant les variations de $\delta^{18}\text{O}$ sur le long terme pendant cette période d'ouverture continentale et d'activité volcanique majeure sont nécessaires et peu de travaux proposent une analyse détaillée à l'échelle de tout le Jurassique inférieur (Jenkyns et al., 2002). Les récentes études de Dera et al. (2011), proposent d'identifier statistiquement la signification des variations de $\delta^{18}\text{O}$ pendant l'ensemble du Jurassique à différentes échelles de temps. Comme la plupart des autres publications, ces travaux suggèrent une augmentation de la $p\text{CO}_2$ atmosphérique et des autres gaz à effet de serre. Cependant, les interprétations proposées permettent de dissocier les facteurs clés mis en jeu. En effet, certaines recherches proposaient une augmentation de la $p\text{CO}_2$ liée à l'éventuelle déstabilisation d'hydrates de méthane (Hesselbo et al., 2000 ; Jenkyns, 2003) notamment corrélée aux excursions isotopiques négatives mis en avant à l'échelle mondiale comme dans les dépôts du Toarcien (e.g., Hesselbo et al., 2007 ; Suan et al., 2010). Dans ces nouveaux travaux, les excursions semblent être principalement localisées à la fin des périodes de réchauffement, et Dera et al. (2011) suggèrent que la déstabilisation des clathrates serait une conséquence du réchauffement et non la cause. Les événements magmatiques étant récurrents pendant le Jurassique, la fréquence des pulses volcaniques peut expliquer le rythme de l'augmentation de la $p\text{CO}_2$ et des épisodes chauds associés à petite comme à grande échelle de temps (Fig. 25). Cependant la compréhension précise de cette relation de cause à effet nécessite d'avantage de datations radiométriques des événements volcaniques et une amélioration des corrélations biostratigraphiques.

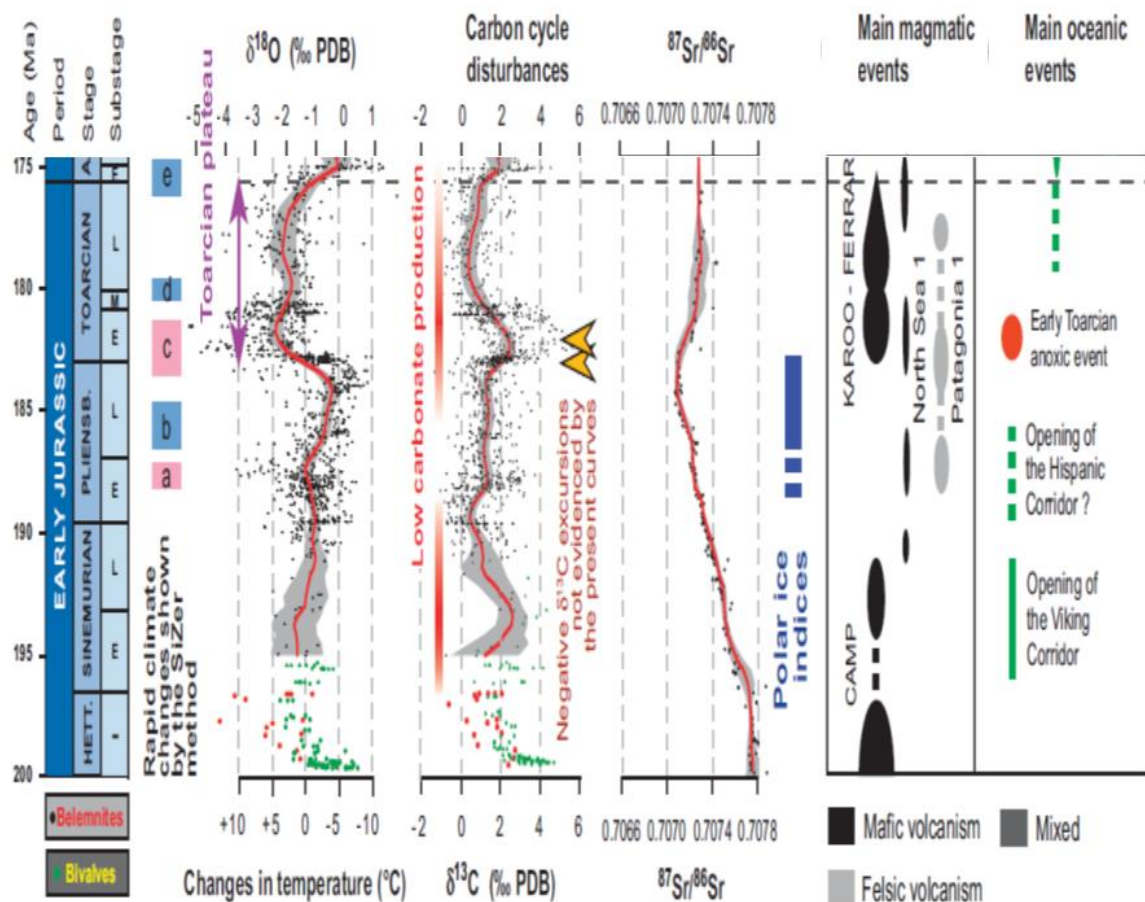


Fig. 25. Comparaison des enregistrements isotopiques de l'oxygène, du carbone et du strontium. L'étude intégrée couplée à la méthode SiZer permet de mettre en évidence des changements de température rapides de l'ordre de 1 à 4 °C pour a, b, d et supérieurs à 8 °C pour c et e (d'après [Dera et al., 2011](#)).

Cette étude met aussi en avant des épisodes de réchauffement qui ne sont pas nécessairement reliés à une perturbation du cycle du carbone. Les isotopes du néodyme permettent d'avancer l'hypothèse de variations dans les courants océaniques liées à l'explosion de la Pangée. Cette hypothèse permet d'expliquer les changements de température de l'eau au début du Pliensbachien ([Dera et al., 2009, 2015](#)) (**Fig. 26**).

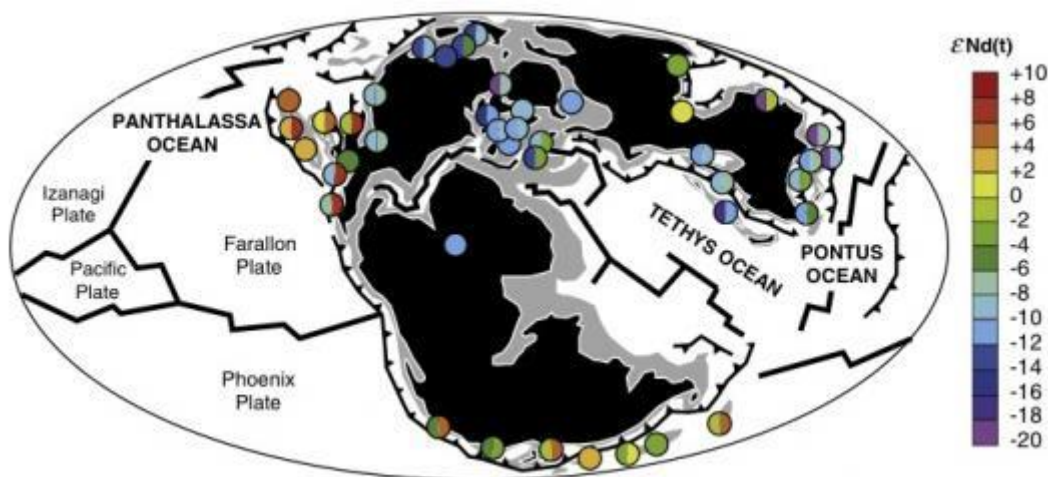


Fig. 26. Synthèse de la distribution spatiale de l'isotopie du néodyme $\epsilon Nd(t)$ dans les sédiments du Jurassique. Les couleurs indiquent les valeurs minimum et maximum mesurées. La carte paléogéographique est celle du Callovien (d'après [Dera et al., 2015](#)).

Les causes des périodes de refroidissement restent obscures et, par analogie avec les glaciations du Phanérozoïque, la diminution de la pCO_2 peut être invoquée. Comme dans le cas de l'intervalle froid du Callovien ([Dromart et al., 2003](#)), des taux élevés d'altération, d'apport de nutriments, de forte productivité primaire et d'enfouissement de la matière organique pendant les périodes chaudes peuvent entraîner en retour une diminution du CO_2 . Ce modèle semble cohérent puisque la plupart des périodes froides du Jurassique sont précédées par des périodes chaudes dont les conditions sont notamment favorables au dépôt de black shales ayant pour conséquence des excursions positives des isotopes du carbone.

1.6 Chronostratigraphie

Sur la base de premiers découpages historiques, quatre étages basés sur les biozonations à ammonites sont actuellement validés par la Commission Internationale de Stratigraphie pour le Jurassique inférieur. Les âges des limites de ces étages sont donnés grâce aux méthodes de radiochronométrie. Néanmoins, la définition de certains étages peut localement poser problème en raison de lacunes stratigraphiques, de condensation, d'érosion ou simplement de l'absence de faune (e.g. [Guex et al., 2001](#) ; [Morard et al., 2003](#)). Certains auteurs ont proposé localement des échelles de polarité magnétique notamment pour le Toarcien ([Galbrun et Daly, 1987](#) ; [Galbrun et al., 1988, 1994](#)) (**Fig. 27**). Cet outil s'avère cependant difficile à exploiter pour des corrélations à l'échelle du domaine ouest-téthysien car la méthode n'est pas forcément utilisable sur tous les affleurements.

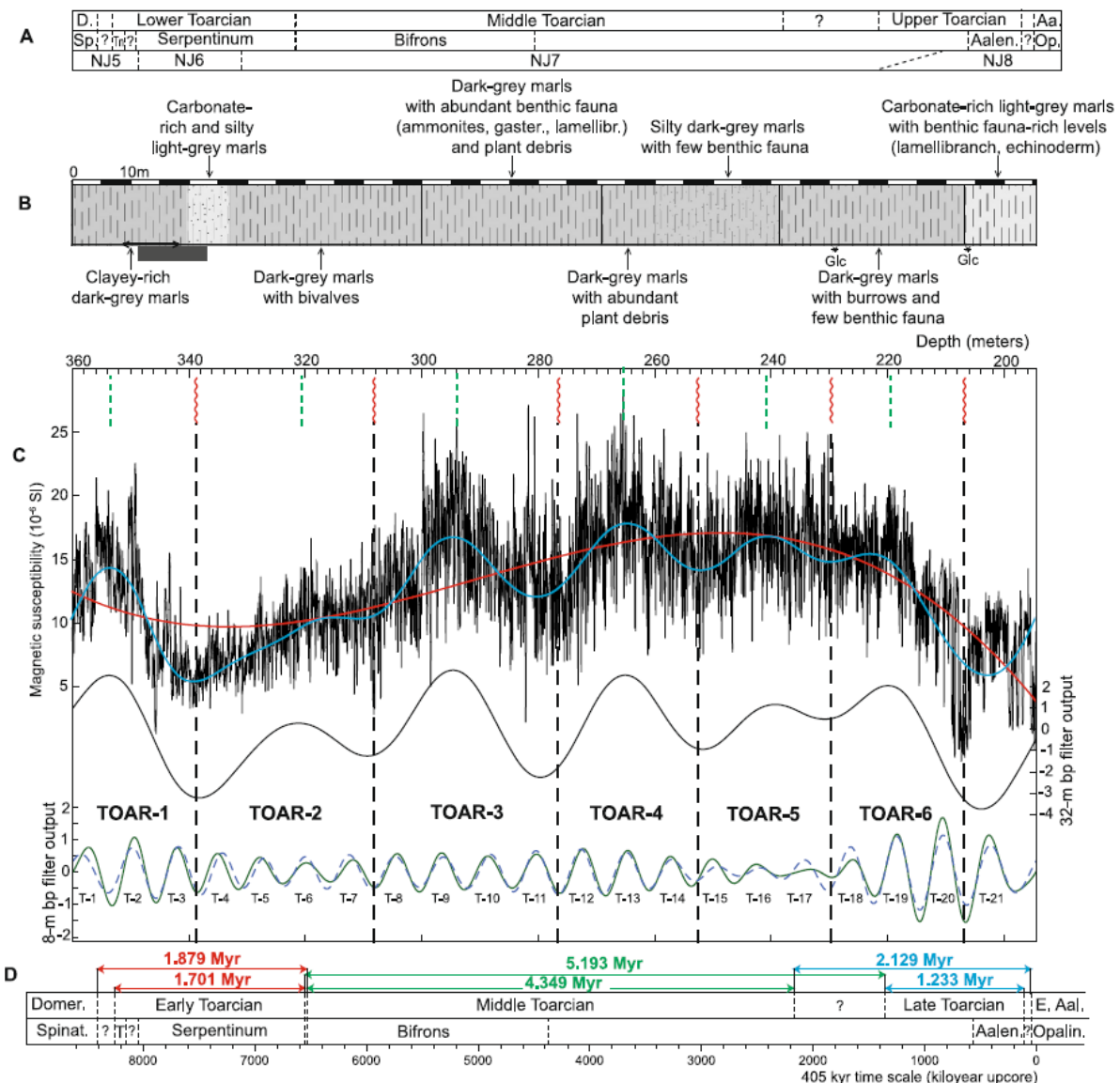


Fig. 27. Etude cyclostratigraphique du Toarcien (A) à partir de la susceptibilité magnétique (C) de la carotte de Couy-Sancerre (B). Les périodes pour les différents étages et biozones sont estimées à partir des cycles de l'excentricité T de 405 ka (D) (d'après Boulila et al., 2014).

De nombreuses études apportent une discussion sur la répartition et l'endémisme des espèces de l'époque (e.g. Mouterde, 1967 ; Elmi, 2005 ; Comas-Rengifo et al., 2013 ; Duarte et al., 2014a). La synthèse des biozones européennes du Jurassique inférieur est présentée dans la Fig. 28. La publication de travaux plus récents (voir les citations précédentes) ont cependant fait évoluer les limites des zonations proposées dans cette figure.

STAGES	AMMONITES				AMMONITES			
	COORD. J. THIERRY				COORD. J. THIERRY			
	NORTHWESTERN EUROPE BOREAL / SUBBOREAL				SOUTHWESTERN EUROPE TETHYAN / SUBMEDITERRANEAN			
	CONTINI, MOUTERDE, RIOULT, ELM, MANGOLD, THIERRY, CARIU, MARCHAND, ENAY				ATROPS, HANTZPERGUE, GEYSANT, CORNA, DOMMERGUES, MEISTER, RULLEAU			
	ZONES		SUBZONES		SUBZONES		ZONES	
180.03 — 180.1 (± 4.0)	TOARCIAN	UPPER	AALENSIS		FLUITANS		AALENSIS	
			180.88	180.88	180.88	180.88	PSEUDORADIOSA	
			181.87	181.87	181.87	181.87	MENEGHINI	
			182.47	182.47	182.47	182.47	SPECIOSUM	
			182.47	182.47	182.47	182.47	DISPANSUM	
			THOUARSENSE		FALLACIOSUM		BONARELLII	
			184.06	184.06	184.06	184.06	THOUARSENSE	
		MIDDLE	VARIABILIS		ALTICARINATUS		GRADATA	
			185.25	185.25	185.25	185.25	VARIABILIS	
			BIFRONS		SEMIPOLITUM		BIFRONS	
			186.04	186.04	186.04	186.04	BIFRONS	
			186.04	186.04	186.04	186.04	BIFRONS	
188.63 — 189.6 (± 4.0)	PLIENSBACHIAN	UPPER	FALCIFORMIS / SERPENTINUS		FALCIFORMIS		LEVISONI	
			188.04	188.04	188.04	188.04	SERPENTINUS	
			TENUICOSTATUM		LEVISONI		TENUICOSTATUM	
			188.04	188.04	188.04	188.04	TENUICOSTATUM	
			188.04	188.04	188.04	188.04	TENUICOSTATUM	
		LOWER	SPINATUM		ELISA		EMACIATUM	
			190.38	190.38	190.38	190.38	EMACIATUM	
			MARGARITATUS		CORNACALDENSE		ALGOVIANUM	
			191.51	191.51	191.51	191.51	ALGOVIANUM	
			191.51	191.51	191.51	191.51	ALGOVIANUM	
195.27 — 195.3 (± 3.9)	SINEMURIAN	UPPER	DAVOEI		DAVOEI		DAVOEI	
			192.64	192.64	192.64	192.64	DAVOEI	
			IBEX		IBEX		IBEX	
			193.77	193.77	193.77	193.77	IBEX	
			193.77	193.77	193.77	193.77	IBEX	
		LOWER	JAMESONI		JAMESONI		JAMESONI	
			194.14	194.14	194.14	194.14	JAMESONI	
			194.52	194.52	194.52	194.52	JAMESONI	
			194.89	194.89	194.89	194.89	JAMESONI	
			194.89	194.89	194.89	194.89	JAMESONI	
201.89 — 201.9 (± 3.9)	HETTANGIAN	UPPER	RARICOSTATUM		RARICOSTATUM		RARICOSTATUM	
			196.83	196.83	196.83	196.83	RARICOSTATUM	
			OXYNOTUM		OXYNOTUM		OXYNOTUM	
			197.61	197.61	197.61	197.61	OXYNOTUM	
			197.61	197.61	197.61	197.61	OXYNOTUM	
		LOWER	OBUSUM		OBUSUM		OBUSUM	
			198.00	198.00	198.00	198.00	OBUSUM	
			198.39	198.39	198.39	198.39	OBUSUM	
			198.77	198.77	198.77	198.77	OBUSUM	
			198.77	198.77	198.77	198.77	OBUSUM	
205.86 — 205.7 (± 4.0)		L	TURNERI		TURNERI		TURNERI	
			199.55	199.55	199.55	199.55	TURNERI	
			SEMICOSTATUM		SEMICOSTATUM		SEMICOSTATUM	
			200.72	200.72	200.72	200.72	SEMICOSTATUM	
			201.11	201.11	201.11	201.11	SEMICOSTATUM	
	HETTANGIAN	MID.	BUCKLANDI		BUCKLANDI		BUCKLANDI	
			201.50	201.50	201.50	201.50	BUCKLANDI	
			201.50	201.50	201.50	201.50	BUCKLANDI	
			201.50	201.50	201.50	201.50	BUCKLANDI	
			201.50	201.50	201.50	201.50	BUCKLANDI	
	HETTANGIAN	L	ANGULATA		ANGULATA		ANGULATA	
			202.36	202.36	202.36	202.36	ANGULATA	
			LIASICUS		LIASICUS		LIASICUS	
			203.78	203.78	203.78	203.78	LIASICUS	
			204.26	204.26	204.26	204.26	LIASICUS	
	HETTANGIAN	L	PLANORBIS		PLANORBIS		PLANORBIS	
			205.19	205.19	205.19	205.19	PLANORBIS	
			PLANORBIS		PLANORBIS		PLANORBIS	
			205.19	205.19	205.19	205.19	PLANORBIS	
			205.19	205.19	205.19	205.19	PLANORBIS	

*

190.13	SOLARE
190.26	LEVIDORSATUM
190.38	MENEGHINI
190.61	ACURATUM
190.63	BERTRANDI
190.76	RAGAZZONI

Fig. 28. Biochronostratigraphie en fonction du domaine boréal et du domaine téthysien. Les âges proposés dans cette synthèse ne sont pas les derniers âges radiométriques et certaines biozones ont été révisées (d'après [Hardenbol et al., 1998](#)).

Les biozones à ammonites et leur durée utilisées dans cette étude sont présentées dans la **Fig. 29**. La caractérisation des limites est donnée dans la partie suivante.

Chronostratigraphy			Ammonite Biozonation	Top age (Ma)
	AALENIAN			
LOWER JURASSIC	TOARCIC	UPPER	Aalensis	174.2
			Meneghini / Pseudoradosa	174.4
			Speciosum / Dispansum / Insigne	174.7
			Bonarellii / Thouarsense	175.0
		MIDDLE	Gradata / Variabilis	176.2
			Bifrons	178.2
		LOWER	Levisionis /Serpentinus /Falciferum	180.4
			Polymorphum / Tenuicostatum	181.7
	PLIENSBACHIAN	UPPER	Spinatum / Emaciatum	182.7
			Margaritatus / Algovianium	183.5
		LOWER	Davoei	187.6
			Ibex	188.5
			Jamesoni	189.4
	SINEMURIAN	UPPER	Raricostatum	190.8
			Oxynotum	192.8
			Obtusum	193.8
		LOWER	Turneri	195.3
			Semicostatum	196.3
			Bucklandi	197.8
	HETTANGIAN	UPPER	Angulata	199.3
		MIDDLE	Liasicus	200.1
		LOWER	Planorbis	200.9
	RHAETIAN			201.3

Fig. 29. Biozones à ammonites et âges de leurs limites utilisés dans le cadre de cette étude. Les âges et durées sont ceux de la Commission Internationale de Stratigraphie donnés grâce aux méthodes de radiochronométrie (Cohen et al., 2015). Les biozonations tiennent compte des corrections apportées par les études récentes citées précédemment (e.g. Ogg and Hinnov, 2012).

.1.7 Cadre séquentiel

L'éclatement de la Pangée et les phases de rifting associées contrôlent l'évolution du niveau marin depuis le Trias jusqu'au Crétacé moyen avec une augmentation du niveau marin au premier ordre (**Fig. 30**). Le Jurassique inférieur s'inscrit au sein de cette période transgressive globale. L'accélération de la subsidence des bassins et le contexte tectonique extensif qui structure le domaine ouest européen en systèmes de horsts et de grabens permet de définir des cycles d'ordres inférieurs ([Guillocheau, 1991](#) ; [Guillocheau et al., 2000](#)). Les modalités de ces cycles de deuxième ordre sont spécifiques à chaque bassin. Deux cycles de deuxième ordre sont observables dans la majorité des bassins. Le premier marque un épisode régressif à la fin du Pliensbachien qui se termine à la limite des biozones *Spinatum* - *Tenuicostatum* (limite Pliensbachien-Toarcien). Cet épisode est marqué par un non-dépôt dans les parties proximales et des dépôts plus calcaires dans les parties distales. Le cycle transgressif de second ordre suivant cet épisode régressif marque le maximum d'inondation du cycle ligure et est observable partout en Europe. Cette élévation importante du niveau marin marque le maximum transgressif de la « transgression liasique » au Toarcien inférieur dans la zone à *Falciferum*. Cette surface marque le maximum d'ennoiement des plates-formes européennes et marque le début de l'épisode anoxique T-OAE. Une dernière phase régressive marque la fin du Jurassique inférieur et la base du Jurassique moyen et se traduit par des quasi-émersions enregistrées par des dépôts oolithiques souvent ferrugineux à l'échelle de l'Europe.

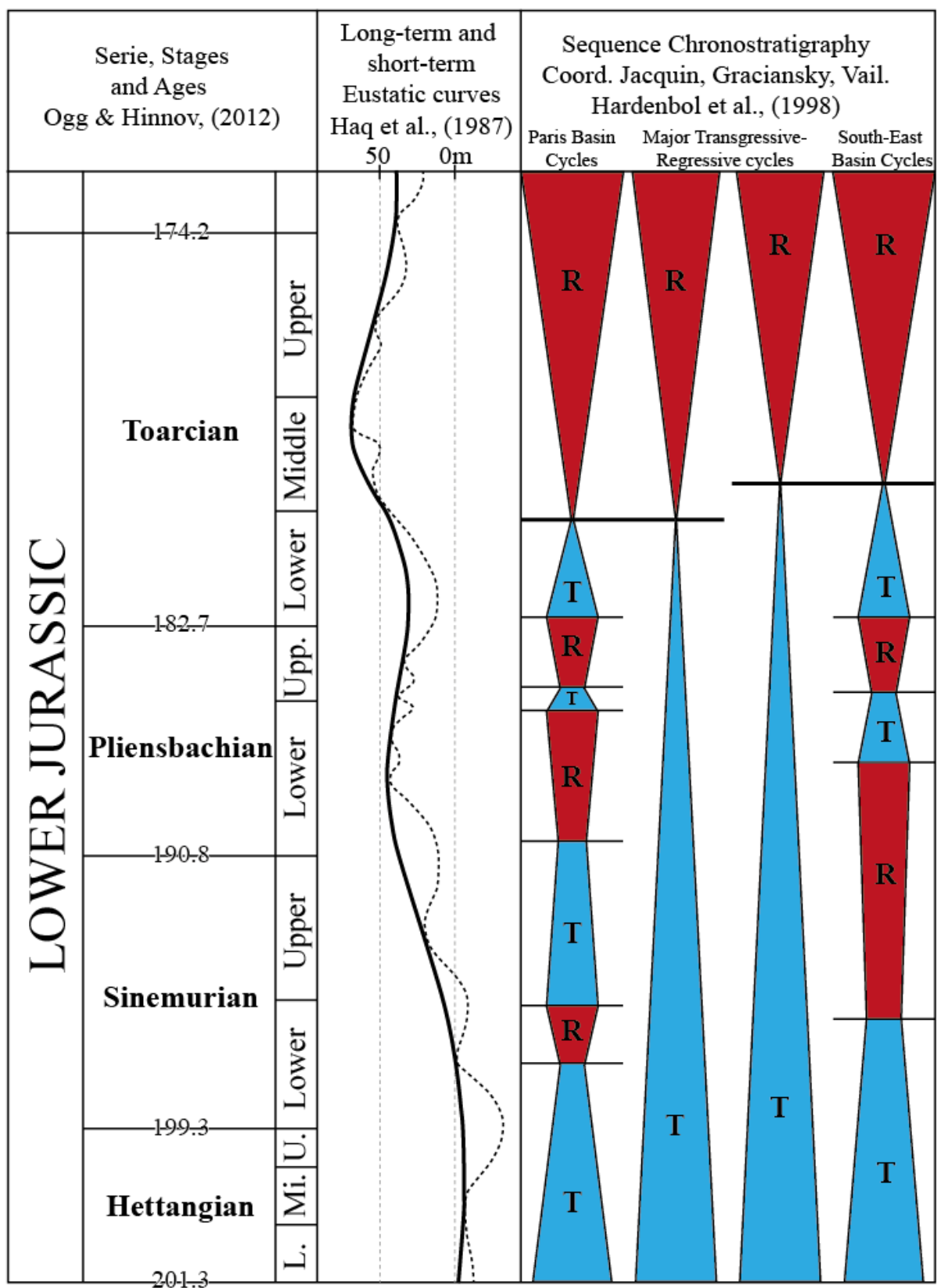


Fig. 30. Séquences chronostratigraphiques et chartes eustatiques pour le Jurassique inférieur (modifié de [Haq et al., 1987](#) ; [Hardenbol et al., 1998](#)).

.2 Lithostratigraphie du Jurassique inférieur ouest-européen

Le sous-système Jurassique inférieur est marqué par une transgression marine sur des reliefs déjà très usés comme le Massif Armoricaïn, le Massif Central ou encore le Massif Ibérique. Le cycle triasique marque les premières invasions marines avec les faciès évaporitiques du Keuper. Une nouvelle tendance transgressive est observable avec l'arrivée des dépôts calcaires et gréseux du Rhétien. La transgression jurassique inférieure est très majoritairement représentée par des sédiments à dominance marneuse et finement détritique. Les épisodes calcaires ne sont que secondaires et épisodiques. Cette transgression a lieu de manière progressive et prend l'apparence d'une série de « pulsations » correspondant sensiblement aux étages et sous-étages. Les discontinuités en résultant sont toujours plus marquées en bordure que dans la partie profonde des bassins.

Dans cette partie sont présentées par ordre chronologique les limites et les modalités des dépôts sédimentaires de l'Hettangien, du Sinémurien inférieur, du Sinémurien supérieur, du Pliensbachien inférieur, du Pliensbachien supérieur, du Toarcien inférieur et moyen et du Toarcien supérieur.

Cette présentation est largement inspirée des travaux disponibles dans les rapports publiés par le Groupe Français d'Etude du Jurassique, l'IFP Energie Nouvelle, la Yorkshire Geological Society, la British Geological Survey, et plus généralement toutes les publications disponibles dans la littérature, complétés par les études de terrain et en carothèque menées pendant cette thèse en France, Angleterre, Espagne, Portugal et Allemagne.

.2.1 Hettangien

L'Hettangien est le premier étage du Jurassique inférieur (de $201,3 \pm 0,2$ à $199,3 \pm 0,3$ Ma) dont la durée est actuellement établie à $2,0 \pm 0,6$ Ma. Le GSSP Rhétien-Hettangien est actuellement établi dans le massif des Karwendel dans les Préalpes orientales septentrionales autrichiennes avec la section de Kuhjoch.

Les biozones à ammonites associées sont *Planorbis*, *Liasicus* et *Angulata* correspondant respectivement à l'Hettangien inférieur, moyen et supérieur.

.2.1.1 Limites

La limite inférieure de l'Hettangien correspond au début de la transgression liasique, elle est généralement marquée par un net changement de faciès dans tous les bassins européens. Cette limite est parfois bien contrainte chronostratigraphiquement comme dans le bassin de Paris où les dépôts détritiques du Rhétien bien datés par le bivalve *Rhaetavicula concorta*, succèdent aux sédiments marno-calcaires riches en ammonite *Psiloceras* (biozone à *Planorbis*). Dans la plupart des cas, cette limite est uniquement lithologique sans être nécessairement isochrone.

La limite supérieure qui marque la transition avec le Sinémurien est davantage calée sur les données paléontologiques avec la disparition des *Schlotheimia* s.s. et l'apparition des Ariétitidés. Des arguments lithologiques interviennent cependant souvent, comme des surfaces

perforées ou des érosions sur la fin de l'étage au niveau des bordures de bassin, ou encore la diminution des Gryphées. Pour le bassin Aquitain, la gouttière normande de l'Ouest du bassin de Paris et le bassin Lusitanien la limite est placée par simplification au toit des évaporites hettangiennes, cependant ces faciès continuent localement dans le Sinémurien.

.2.1.2 Dépôts

La transgression marine de premier ordre n'atteint que la partie est de l'Europe à l'Hettangien, alors que la partie ouest, reste encore très confinée (**Fig. 31**). Trois grands domaines sont distinguables : une partie orientale marine largement ouverte en direction de la Téthys avec le bassin du Sud-Est ; une partie marine relativement peu profonde englobant l'ensemble des bassins autour du Massif London-Brabant (Angleterre, Allemagne et l'Est du bassin de Paris) ; une partie confinée et peu profonde marquée par des faciès évaporitiques et/ou dolomitiques comprenant l'Ouest du bassin de Paris, le bassin Aquitain/Cantabrien et le bassin Lusitanien. Les influences détritiques terrigènes sont localisées à l'Ouest et au Sud du Massif London-Brabant. Des dépôts silicoclastiques sont également localisés dans la partie méridionale du bassin de Paris et septentrionale du bassin Aquitain, dont les sources se situent au niveau des Massifs Armoricaïn et Central encore connectés au début de l'Hettangien.

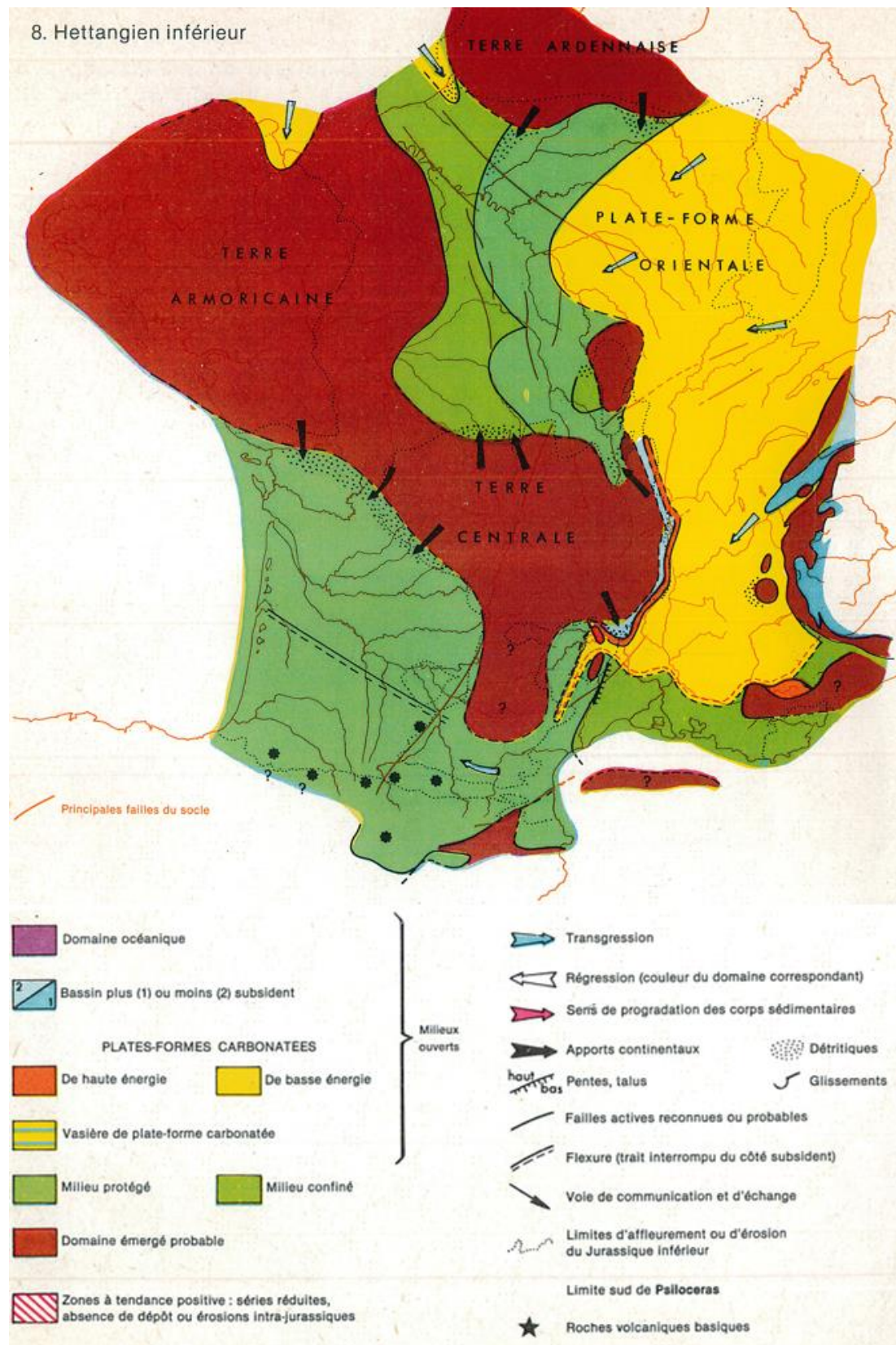


Fig. 31. Paléogéographie de la France à l'Hettangien inférieur. La partie ouest du bassin de Paris et le bassin Aquitain présentent des environnements confinés alors que le bassin du Sud-Est est très ouvert vers la Téthys (d'après [Mouterde et al., 1980](#)).

.2.2 Sinémurien inférieur

Le Sinémurien inférieur est la partie basale du deuxième étage du Jurassique inférieur (de $199,3 \pm 0,3$ – environ $195,3$ Ma) dont la durée est établie à environ 4 Ma. Le GSSP Hettangien-Sinémurien est actuellement défini dans l'Ouest du comté anglais du Somerset avec la section de Quantoxhead. L'appellation « Sinémurien » est souvent spécifique du Sinémurien inférieur dans la littérature française, le Sinémurien supérieur étant dénommé « Lotharingien » dans les travaux anciens.

Les biozones à ammonites associées sont *Bucklandi*, *Semicostatum* et *Turneri*.

.2.2.1 Limites

La limite inférieure du Sinémurien est marquée par l'apparition des Ariétitidés dans les parties marines. Les faciès sont plus bioclastiques qu'à l'Hettangien et la fin des évaporites marquent le début du Sinémurien dans les parties confinées.

Sa limite supérieure est définie paléontologiquement par l'apparition des *Asteroceras* et des *Promicroceras*, synchrone avec le développement de faciès plus argileux.

.2.2.2 Dépôts

La transgression continue de progresser. L'influence marine gagne la bordure occidentale du bassin de Paris, tandis que les faciès s'approfondissent pour les bassins du Sud-Est, de Cleveland, du Wessex et les bassins allemands. Le bassin Aquitain lagunaire reste confiné et l'influence marine n'est pas encore clairement exprimée. Pour les bassins Lusitanien et Cantabrien, les dépôts évaporitiques font place aux dolomies puis aux faciès de plateforme carbonatée relativement peu profonde.

Les apports silicoclastiques restent localisés au Sud du Massif London-Brabant et du Massif Armoricaïn.

.2.3 Sinémurien supérieur

Le Sinémurien supérieur est la partie supérieure du deuxième étage du Jurassique inférieur (de environ $195,3$ à $190,8 \pm 1,0$ Ma) dont la durée est actuellement établie à environ 4,5 Ma. L'appellation « Lotharingien » est souvent utilisée pour le Sinémurien supérieur dans la littérature française.

Les biozones à ammonites associées sont *Obtusum*, *Oxynotum* et *Raricostatum*.

.2.3.1 Limites

La limite inférieure du Sinémurien supérieur est marquée, dans les zones de mer ouverte, par l'apparition des *Asteroceras*. Chez les lamellibranches, *Gryphaea cymbium* remplace *G. arcuata* et ses variétés. Le Sinémurien supérieur est marqué par l'apparition de faciès plus marneux qu'au Sinémurien inférieur, mais ce changement n'est pas synchrone.

La limite supérieure correspond à la disparition des *Echioceras*. Des discontinuités sédimentaires sont également observables vers la fin de l'étage.

.2.3.2 Dépôts

La transgression se poursuit. Les faciès s'approfondissent dans les bassins anglais et dans le bassin de Paris, et plus généralement dans tout l'Ouest de l'Europe (**Fig. 32**). Le centre du bassin du Sud-Est présente une subsidence prononcée. Le passage entre le domaine provençal et le domaine aquitain commence à être plus marqué avec des faciès moins confinés. Dans le reste du bassin Aquitain la sédimentation reste encore de type protégé mais la transgression fait apparaître les premiers faciès de type marin, surtout dans la partie sud. Le bassin Cantabrien, déjà marin, traduit la même tendance avec un approfondissement progressif des faciès vers la partie méridionale. Le bassin Lusitanien marque à cette période une légère régression tout en restant dans des faciès carbonatés de plateforme.

Les sources détritiques concernent à cette période principalement l'Ouest du bassin de Paris et le Cotentin encore rattaché au bassin du Wessex. Ces apports sont en provenance du Massif Armoricain et témoignent d'un probable basculement dans le système de transport des particules terrigènes.

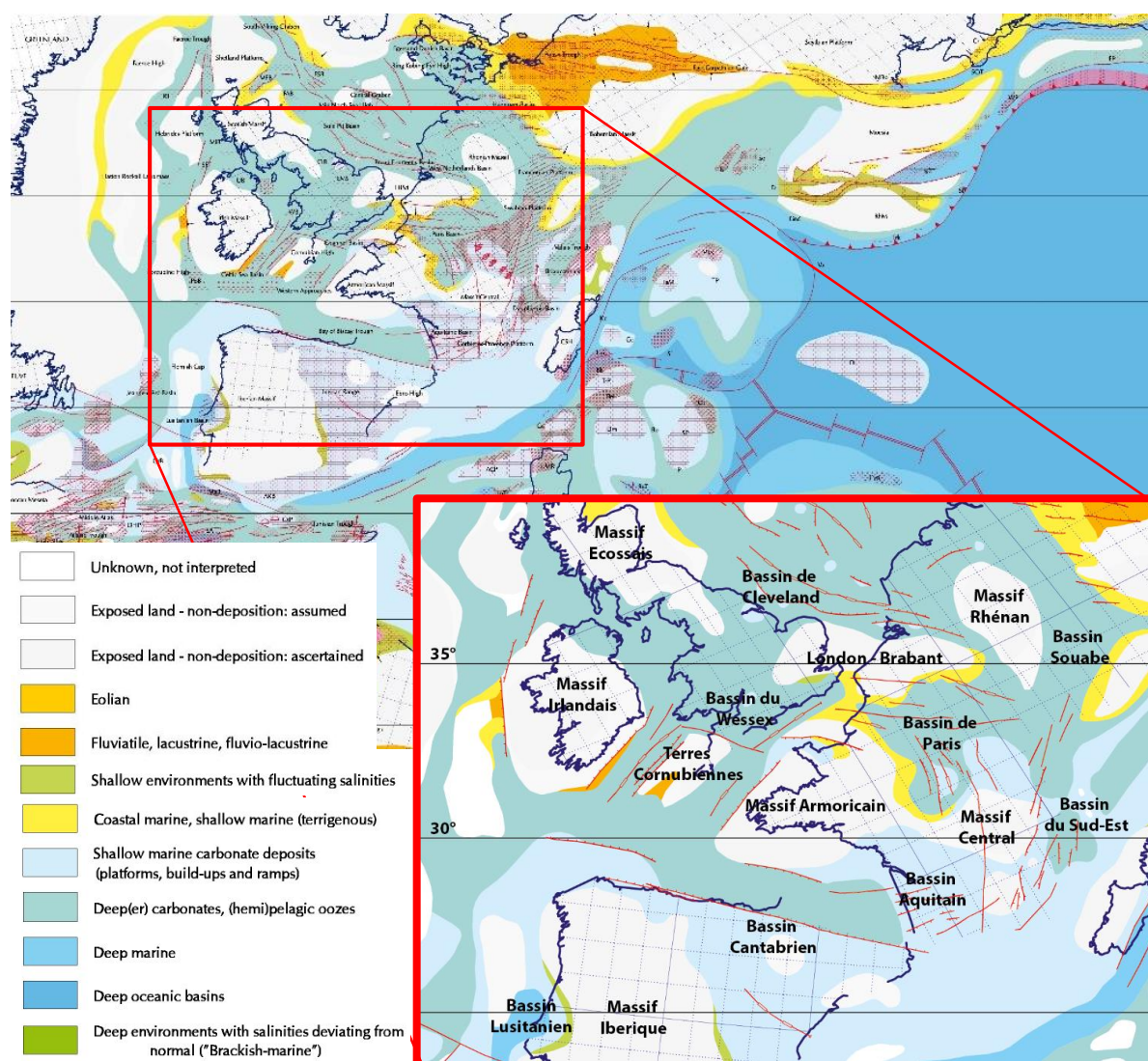


Fig. 32. Paléogéographie de l'Europe au Sinémurien supérieur (modifié de [Thierry et al., 2000](#)).

.2.4 Pliensbachien inférieur

Le Pliensbachien inférieur est la partie basale du troisième étage du Jurassique inférieur (de $190,8 \pm 1,0$ à environ $184,4$ Ma) dont la durée est établie à environ $5,4$ Ma. Le GSSP Sinémurien-Pliensbachien est actuellement défini dans le comté anglais du Yorkshire avec la section de Robin Hood's Bay. L'appellation « Carixien » est souvent spécifique du Pliensbachien inférieur dans la littérature française, le Pliensbachien supérieur étant dénommé « Domérien ».

Les biozones à ammonites associées sont *Jamesoni*, *Ibex* et *Davoei*.

.2.4.1 Limites

La limite inférieure du Pliensbachien est généralement facilement identifiée grâce à sa faune riche, notamment avec l'apparition de nombreuses ammonites. Une nette discontinuité sépare en générale le Sinémurien supérieur du Pliensbachien. La transgression est progressive et les premières biozones sont souvent absentes.

La limite supérieure est beaucoup plus progressive avec l'invasion marine pendant la zone à *Davoei*. Les faciès sont très souvent identiques avec la partie basale du Pliensbachien supérieur.

.2.4.2 Dépôts

Les dépôts témoignent de l'impulsion transgressive et s'organisent autour des secteurs subsidents localisés au cœur des bassins à cette époque. La sédimentation est globalement composée d'alternances marno-calcaires ou argilo-calcaires dans les parties profondes et de calcaires bioclastiques dans les parties proximales partout en Europe. L'enneigement du Massif Central est probable à cette période. La connexion entre bassin Parisien et bassin Aquitain n'est cependant probablement pas complète.

La fraction argileuse terrigène des dépôts marneux peut difficilement être rattachée à des sources précises. Cependant la majorité des dépôts calcaires bioclastiques peu profonds présente une composante gréseuse non négligeable laissant penser à une période d'érosion et d'apport diffus depuis l'ensemble des terres émergées. En revanche, les apports silicoclastiques plus grossiers sont bien exprimés et localisés dans l'Ouest du bassin de Paris et dans le bassin de Cleveland.

.2.5 Pliensbachien supérieur

Le Pliensbachien supérieur est la partie terminale du troisième étage du Jurassique inférieur (de environ $184,4$ à $182,7 \pm 0,7$ Ma) dont la durée est établie à environ $1,7$ Ma. Comme indiqué précédemment, l'appellation « Domérien » est souvent spécifique du Pliensbachien supérieur dans la littérature française.

Les biozones à ammonites associées sont *Margaritatus/Algovianium* et *Spinatum/Emaciatum*, le premier genre faisant référence au domaine boréal ou subboréal tandis que le deuxième fait référence au domaine téthysien ou subméditerranéen.

.2.5.1 Limites

La limite inférieure de Pliensbachien supérieur est souvent difficile à localiser car les faciès du sommet du Pliensbachien inférieur (sous-zone à *Figulinum*) sont très souvent identiques à ceux qui leur succèdent. Paléontologiquement, la disparition des *Oistoceras* fait office de repère car localement l'apparition des Amalthées correspond à la fin du Pliensbachien inférieur. Dans les endroits où l'identification n'est pas possible, un horizon à *Procanavaria nitescens* est fréquemment observable au début du Pliensbachien inférieur.

.2.5.2 Dépôts

La séquence Pliensbachien supérieur est marquée dans sa partie basale par la continuité de l'épisode marno-calcaire ou argilo-calcaire du Pliensbachien inférieur dans la biozone à *Margaritatus*. Un changement de faciès lié à un court épisode régressif intervient à l'échelle de l'Europe. Les faciès calcaires bioclastiques, cantonnés aux bordures des terres émergées au Pliensbachien inférieur, s'étendent vers le centre des bassins. Cette transition vers des faciès plus calcaires ne se fait pas de manière synchrone. Une érosion générale marque la fin de cette période avec plusieurs surfaces perforées observables avec parfois le manque de la sous-zone *Hawskerense* voire de la zone à *Tenuicostatum* de la base du Toarcien.

Les apports terrigènes prennent des aspects beaucoup plus grossiers avec le retrait de la mer. Des grès voire des conglomérats se déposent dans les bassins de Paris, du Wessex et de Cleveland sur les bordures respectives du Massif Armoricain, de Terres Cornubiennes et du Massif Ecossais.

.2.6 Toarcien inférieur et moyen

Le Toarcien inférieur et le Toarcien moyen ont été regroupés pour leur présentation dans cette thèse. Cet intervalle correspond à la partie basale du quatrième et dernier étage du Jurassique inférieur (de $182,7 \pm 0,7$ à environ 177,7 Ma) dont la durée est établie à environ 5,0 Ma. Le GSSP Pliensbachien-Toarcien a récemment été ratifié (décembre 2014) et définit dans la région de Lisbonne au Portugal avec la section de Peniche.

Les biozones à ammonites associées sont *Tenuicostatum/Polymorphum* et *Falciferum-Serpentinus/Levisioni* pour le Toarcien inférieur et *Bifrons* et *Variabilis/Gradata* pour le Toarcien moyen ; le premier genre faisant référence au domaine boréal ou subboréal tandis que le deuxième fait référence au domaine téthysien ou subméditerranéen.

.2.6.1 Limites

Après la tendance régressive du Pliensbachien supérieur, la limite inférieure du Toarcien arrive avec une sédimentation à dominante argileuse qui s'étend largement du centre des bassins vers leurs bordures marquant la reprise de la transgression de premier ordre. Des lacunes sont fréquemment observables et font suite à l'arrêt de sédimentation et à l'érosion du Pliensbachien terminal. La distinction est donc faite de manière relativement simple à l'exception des parties restées profondes au Pliensbachien supérieur où la sédimentation est très similaire à la zone à *Tenuicostatum*. La zone à *Bifrons* marque le maximum transgressif avec une généralisation des faciès marneux à *Hildoceras bifrons* à l'échelle de l'Europe.

La limite supérieure du Toarcien moyen au toit de la zone à *Variabilis/Gradata* présente des aspects lithologiques variés, preuve de la fin de la transgression au premier ordre et du début de la régression. Dans le centre des bassins la sédimentation marneuse continue et la transition n'est pas évidente. Les faciès en bordure de terres émergées présentent régulièrement des passées sableuses ou composées d'oolithes ferrugineuses comme au niveau du passage du bassin Parisien au bassin Aquitain dans le Poitou, ou encore dans les bassins du Wessex et de Cleveland. Un arrêt de sédimentation est parfois observable dans les parties les plus proximales.

.2.6.2 Dépôts

La sédimentation marno-calcaire ou argilo-calcaire prolonge celle du Pliensbachien supérieur dans les parties profondes et vient recouvrir les faciès plus calcaires ou gréseux dans les parties proximales (**Fig. 33**). Les dépôts marneux riches en matière organique des formations Schistes-carton en France, Posidonienschiefer en Allemagne et Jet-Rock dans le bassin de Cleveland semblent se développer depuis le centre des bassins vers les bordures pendant la zone à *Serpentinus*. Dans le bassin Lusitanien la tectonique locale entraîne le dépôt de turbidites sableuses. Les faciès varient surtout dans les parties proximales, où le début de la régression au Toarcien moyen engendre des faciès gréseux ou oolithiques voire l'émersion et le non dépôt sur la bordure des terres émergées partout en Europe.

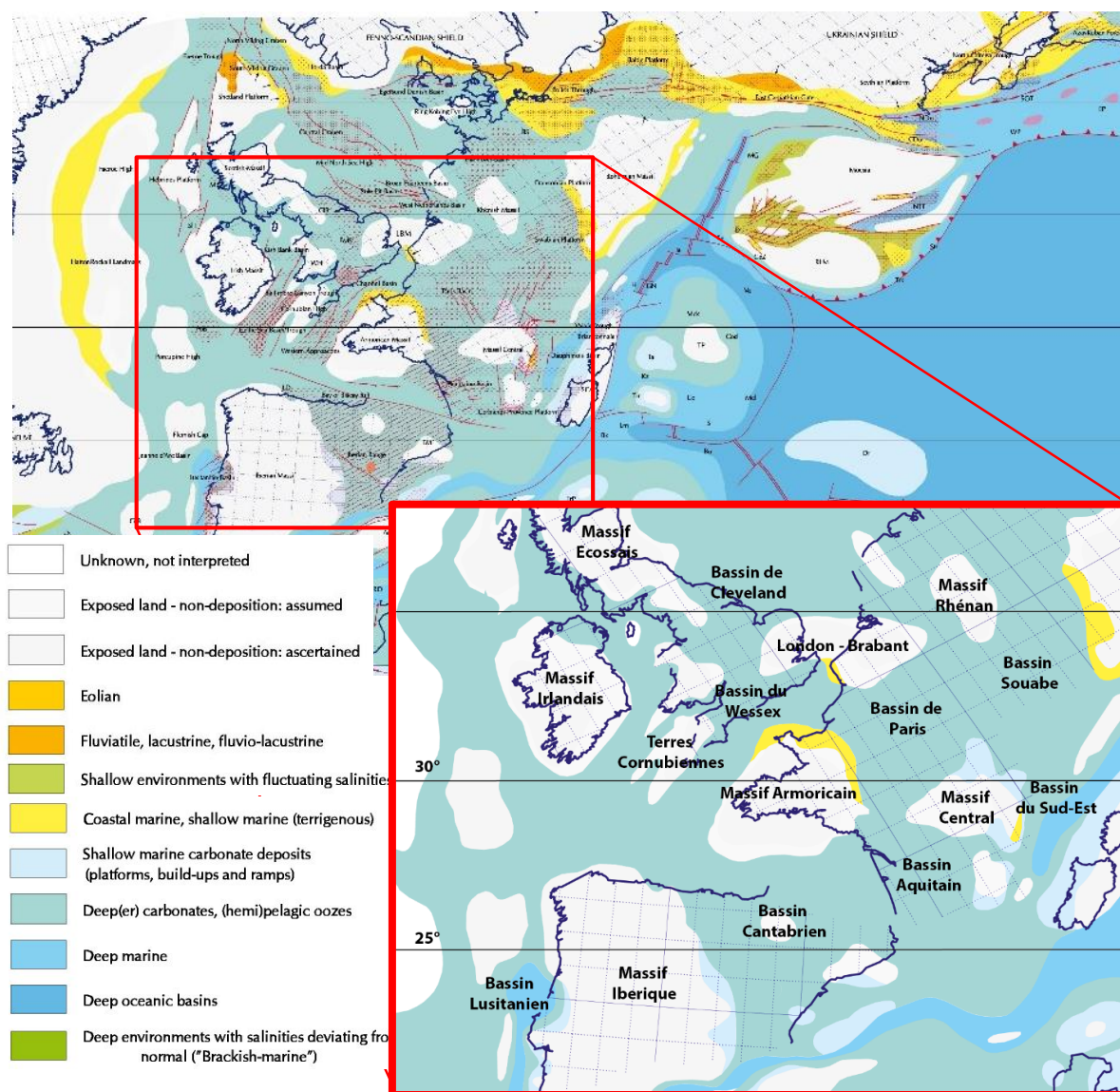


Fig. 33. Paléogéographie de l'Europe au Toarcien inférieur (modifié de [Thierry et Barrier, 2000](#)).

.2.7 Toarcien supérieur

Le Toarcien supérieur correspond à la partie terminale du quatrième et dernier étage du Jurassique inférieur (de environ 177,7 à $174,1 \pm 0,7$ Ma) dont la durée est établie à environ 3,6 Ma.

Les biozones à ammonites associées sont *Thouarsense/Bonarellii*, *Dispansum-Insigne/Speciosum*, *Pseudoradosa/Meneghini* et *Aalensis* ; le premier genre faisant référence au domaine boréal ou subboréal tandis que le deuxième fait référence au domaine téthysien ou subméditerranéen.

.2.7.1 Limites

La limite inférieure est marquée par des faciès plus variés dans les parties proximales avec l'apparition de niveaux gréseux et oolithiques. Les parties les plus profondes ne présentent pas de réel changement lithologique.

La limite supérieure est associée au ralentissement de la sédimentation voire à la présence de lacunes ou d'émersions locales. Elle est souvent difficile à localiser précisément et est alors fixée au niveau des discontinuités de sédimentation.

.2.7.2 Dépôts

Dans le Nord de l'Europe, les formations marno-calcaires font très souvent place à des faciès gréseux comme dans les bassins du Wessex et de Cleveland. Cette observation est généralement le cas pour l'ensemble des dépôts à proximité des terres émergées dans le reste de l'Europe où des oolithes, comme sur les bords du bassin Parisien ou dans le bassin Lusitanien, ou des sables viennent recouvrir les dépôts du Toarcien moyen. Des émersions marquent les domaines proximaux et certaines lacunes se retrouvent localement dans le centre des bassins.

.2.8 Taux de sédimentation

Des taux de sédimentation très variables sont mesurables tout au long du Jurassique inférieur. De manière générale, ces taux sont toujours plus élevés dans les parties distales. A l'inverse, les parties proximales montrent des taux de sédimentation moins élevés. Il est compliqué de donner des valeurs précises en raison de la grande variabilité en fonction de la position au sein d'un même bassin. Les taux présentés ici sont des exemples locaux donnant les ordres de grandeur. Dans les faits, les taux de sédimentation sont généralement compris dans une fourchette de 30 à 80 m.Ma⁻¹ et leurs variations se font surtout en fonction de la position dans les bassins et de la morphologie de ces derniers.

L'Hettangien est caractérisé par des taux de sédimentation relativement faibles de l'ordre de 30 à 50 m.Ma⁻¹. Ces valeurs ont tendance à diminuer jusqu'à la fin du Sinémurien voire le début du Pliensbachien. Le bassin Aquitain, et notamment sa partie sud, et le bassin du Sud-Est sont plus subsidents et présentent des valeurs plus élevées. A partir du Pliensbachien inférieur, les taux de sédimentation augmentent partout en Europe mais pas de manière synchrone. Les valeurs dépassent souvent largement celles enregistrées pendant l'Hettangien pouvant atteindre environ 130 m.Ma⁻¹ dans les parties les plus subsidentes du bassin de Paris. Au Toarcien, les taux de sédimentation ont tendance à rediminuer et à retrouver des valeurs proches de celles de l'Hettangien ou du Sinémurien.

.2.9 Synthèse et commentaires

A partir de l'Hettangien inférieur, on voit s'affirmer progressivement la transgression marine liasique partout en Europe. La sédimentation marno-calcaire gagne progressivement les aires continentales hercyniennes ennoyant certaines grandes surfaces de terre émergées comme le Massif Central en France. Les faciès confinés vont laisser place à des dépôts de mer de plus en plus largement ouverte. A la fin du Jurassique inférieur, les communications semblent

largement établies entre les différents bassins avec l’immersion de la plupart des seuils. La répartition des faunes nectoniques est bien plus globale que pour les faunes benthiques pour lesquelles les particularismes locaux restent bien marqués. Le ralentissement de la subsidence et le régime de sédimentation réduite qui caractérise le Jurassique inférieur persiste pendant le début de l’Aalénien. Plus tard, à l’Aalénien moyen, les plateformes carbonatées qui dominent l’Europe vont se mettre en place et perdurer jusqu’au Callovien.

Même si l’histoire et l’évolution des faciès sur la période du Jurassique inférieur est globalement bien comprise certains aspects restent encore mal connus. C’est le cas, par exemple, pour les sources d’éléments détritiques fins qui restent difficilement identifiables. Un problème majeur est de savoir dans quelle mesure les connexions entre bassins sont franchement établies et à quel moment. Cette dissociation des bassins et de leurs faciès entraîne également des difficultés à établir le synchronisme des dépôts d’un bassin à l’autre. Même au sein d’un même bassin les transitions entre étages sont parfois floues en raison du diachronisme des changements de faciès. Ces incertitudes peuvent avoir un impact important en termes de régulation des processus conduisant au dépôt de roche-mère. Les hypothèses retenues et les partis pris sont expliqués et détaillés dans la partie « Etude intégrée et modélisation numérique ».

.3 Les roches mères

Différents niveaux de roches mères ont été localisés dans le Jurassique inférieur (**Table 1**). Ces différents intervalles riches en matière organique et la bibliographie associée sont présentés rapidement dans ce paragraphe. Chaque niveau étudié est plus spécifiquement détaillé dans les chapitres suivants.

Basin, sill or area	Source Rock Age	Av TOC (wt %)	Min/max TOC (wt %)	Thickness (m)
Paris	Hettangian	2.5	1 to 4	4 to 15
Paris	Upper Sinemurian	3	2 to 6	20 to 60
Paris	Lower Pliensbachian	2	0.5 to 4	10 to 30
Paris	Lower Toarcian	5	3 to 7	20 to 70
Aquitaine	Lower Toarcian	1.2	0.5 to 2.8	?
Aquitaine	Upper Pliensbachian	1	0.5 to 2	5 to 10
South-East	Lower Toarcian	0.2	0 to 5.5	
Channel	Hettangian/Sinemurian	3	1 to 8	5 to 40
Bresse/Jura	Lower Toarcian	1.5	0.7 to 4.8	5 to 20
Causses	Lower Toarcian	2	1 to 12	2 to 10

Table 1. Caractéristiques des roches mères dans différents bassins. Les valeurs de TOC présentent de fortes variations d’un bassin à un autre mais aussi dans le temps et l’espace au sein du même bassin.

.3.1.1 Bassin de Paris

Pour le bassin de Paris, un premier niveau est remarquable à la base de l'Hettangien et principalement localisé dans l'Est du bassin sur quelques mètres d'épaisseur et influencé par des apports de matière organique terrestre (**Fig. 34**). Un intervalle plus épais mais dont les valeurs de TOC sont très variables est référencé dans le Sinémurien supérieur pouvant atteindre une soixantaine de mètres dans le centre du bassin (biozone à *Bucklandi* et *Semicostatum*). La base du Pliensbachien (biozone à *Jamesoni*) présente un intervalle plus localisé dans la partie méridionale pouvant atteindre une trentaine de mètres. L'intervalle le plus riche se situe à la base du Toarcien avec la formation des Schistes carton (biozone à *Tenuicostatum* et *Falciferum*) présentant une épaisseur pouvant atteindre 70 mètres et des valeurs de TOC élevées et continues. Un dernier intervalle est identifiable localement dans le Toarcien supérieur mais avec des valeurs de TOC moins élevées (e.g. [Espitalié et al., 1987](#) ; [Hollander et al., 1991](#) ; [Hanzo et Espitalié., 1993](#) ; [Bessereau et al., 1995](#) ; [Disnar et al., 1996](#) ; [Delmas et al., 2002](#)).

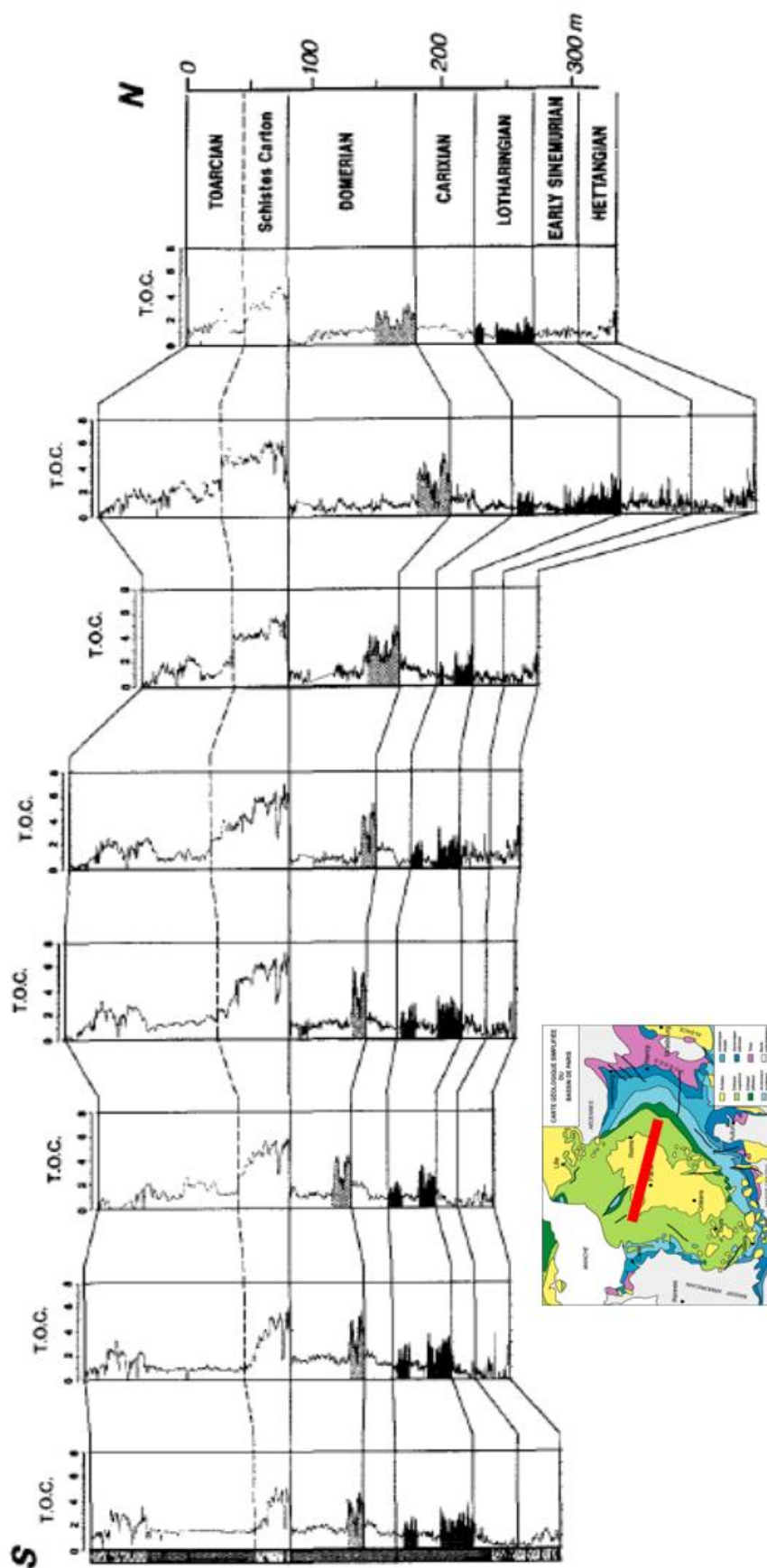


Fig. 34. Répartition du TOC sur un transect du bassin de Paris (d'après Bessereau et al., 1992).

.3.1.2 Bassin Souabe

Pour le bassin Souabe, un niveau riche à la base de l'Hettangien est observable dans la continuité du bassin de Paris. Le niveau le plus important se situe à la base du Toarcien (biozone à *Tenuicostatum* et *Falciferum*) avec la formation des Posidonien-schiefer (Fig. 35), dont l'épaisseur est variable (Littke et al., 1991 ; Schmid-Röhl et al., 2002 ; Frimmel et al., 2004 ; Song et al., 2015).

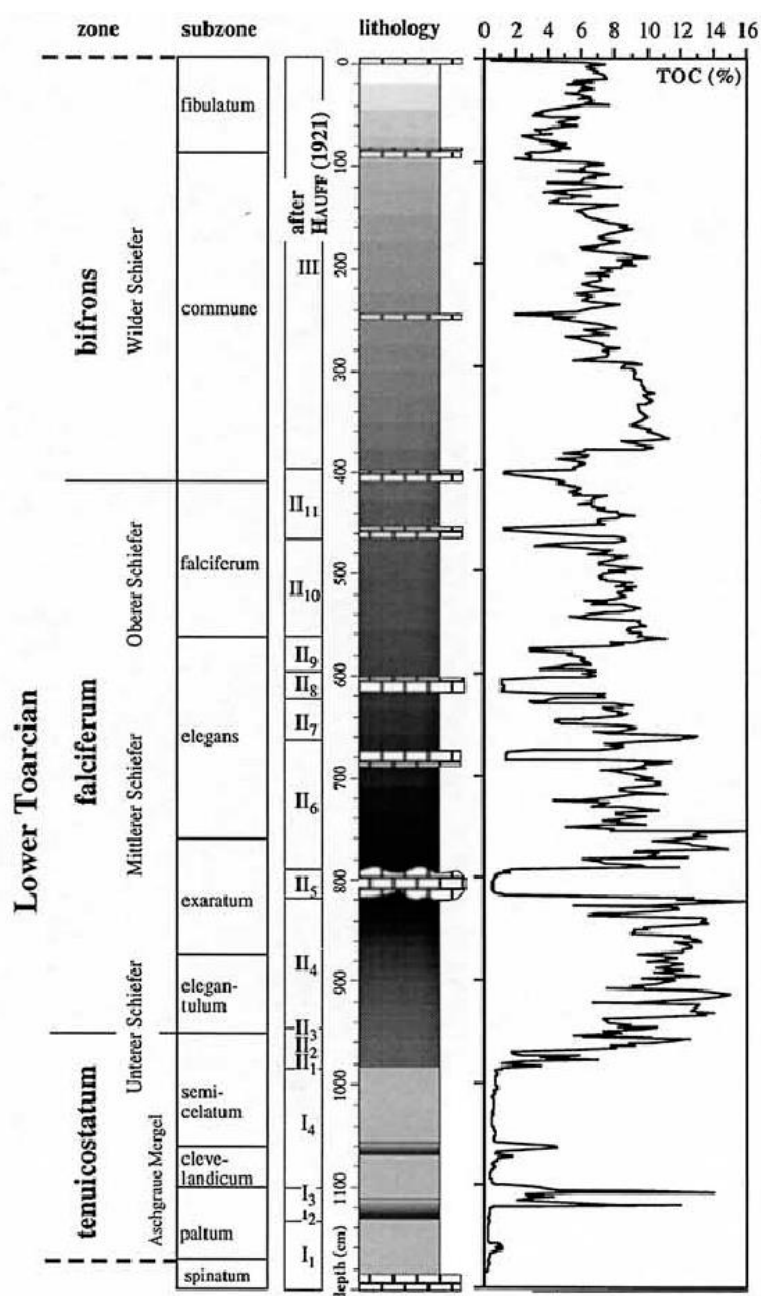


Fig. 35. Répartition du TOC de la section Dotternhausen, Sud-Ouest de l'Allemagne (d'après Schmid-Röhl et al., 2002).

.3.1.3 Bassin du Sud-Est

Pour le bassin du Sud-Est, les fortes profondeurs d’enfouissement des dépôts du Jurassique inférieur ont très largement contribué à l’expulsion de la majorité de la matière organique présente dans les roches mères ([Razin et al. 1996](#)). Sur la bordure nord, les observations sont similaires à celles de l’Est du bassin de Paris ou du bassin Souabe. La dépendance à caractère plus isolé du bassin des Causses présente des valeurs élevées de TOC pour le Toarcien inférieur (biozone à *Tenuicostatum* et *Falciferum*) sur des épaisseurs très variables ([Wannesson et Bessereau, 1999](#) ; [Jacquart et Deville, 1996](#) ; [Leonide, 2007](#)).

.3.1.4 Channel Basin

Pour le Channel Basin, le principal intervalle riche en matière organique se situe au niveau de l’Hettangien – Sinémurien sur une quarantaine de mètres (biozone *Angulata* et *Bucklandi*) dans la formation Blue Lias ([Fig. 36](#)) ([Butler, 1998](#) ; [Buchanan, 1998](#) ; [Gallois et Paul, 2009](#)). Les valeurs de TOC y sont très variables (2 à 8 wt %). Le Toarcien est représenté dans ce bassin par de forts apports clastiques sans matière organique conservée ([Ainsworth et al., 1998](#)).

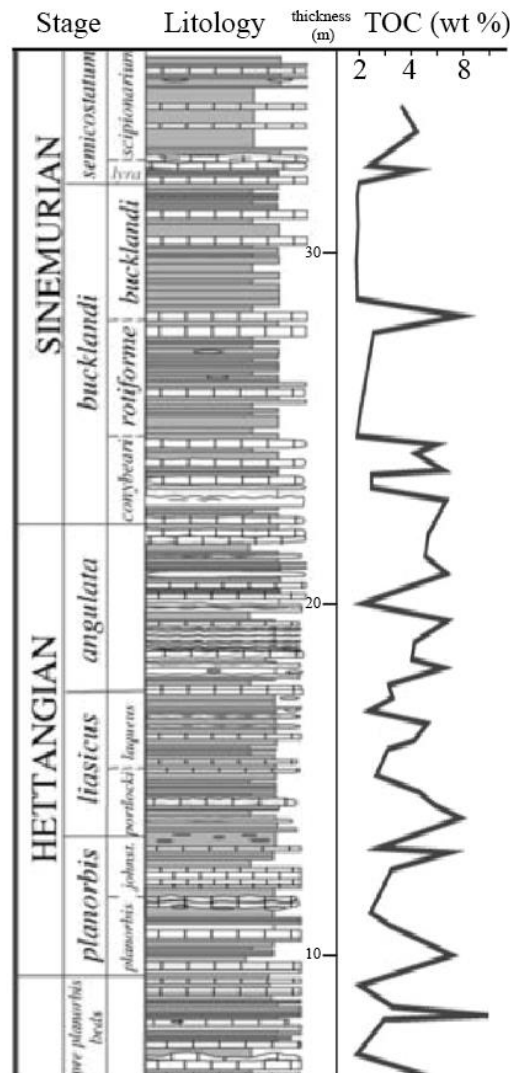


Fig. 36. Répartition du TOC de la section de East-Quantoxhead dans le Somerset, Sud-Ouest du Royaume-Uni (d’après [Deconinck et al., 2003](#)).

.3.1.5 Bassin Cantabrien

Pour le bassin Cantabrien, le premier intervalle riche est localisé à la fin du Sinémurien et un deuxième est observable à la fin du Pliensbachien (biozone à *Margaritatus*) (**Fig. 37**). Ils présentent des valeurs de TOC irrégulières sur une dizaine de mètres. Un intervalle plus riche et dont les valeurs sont plus continues est répertorié dans le centre du bassin au Toarcien inférieur (biozone à *Tenuicostatum* et *Falciferum*) ([Quesada, 2013](#)).

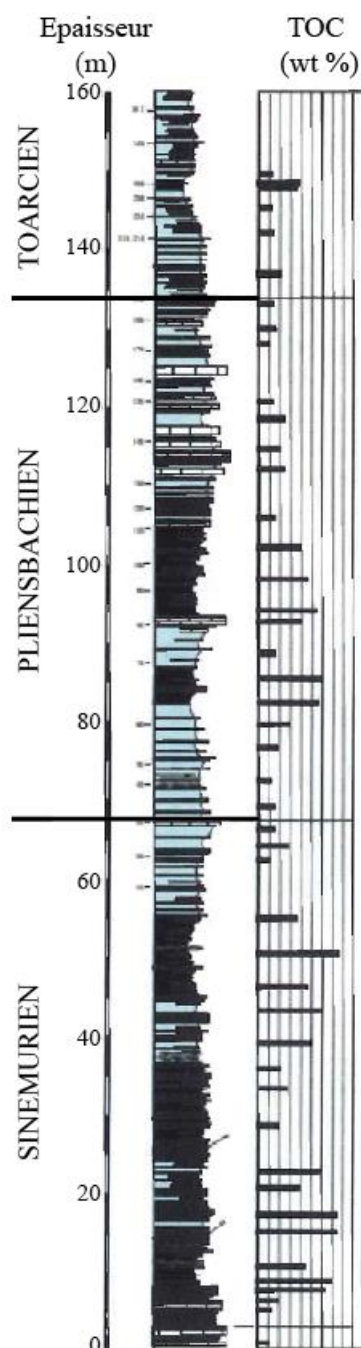


Fig. 37. Répartition du TOC de la section de Santiurde de Reinosa dans le bassin Cantabrien, Nord de l'Espagne (modifié de [Quesada, 2013](#)).

3.1.6 Bassin Lusitanien

Pour le bassin Lusitanien, deux intervalles marneux présentent des niveaux riches en matière organique marine : le Sinémurien supérieur (0 à 12 wt %) biozones à *Oxynotum* et *Raricostatum*) et le Pliensbachien supérieur (0 à 15 wt %, biozones à *Davoei* et *Margaritatus*) (

Fig. 38) (e.g. [Duarte et al., 2014b](#)). La base du Sinémurien présente une forte influence d'apport de matériel organique terrestre (e.g. [Mendonça Filho et al., 2011](#)).

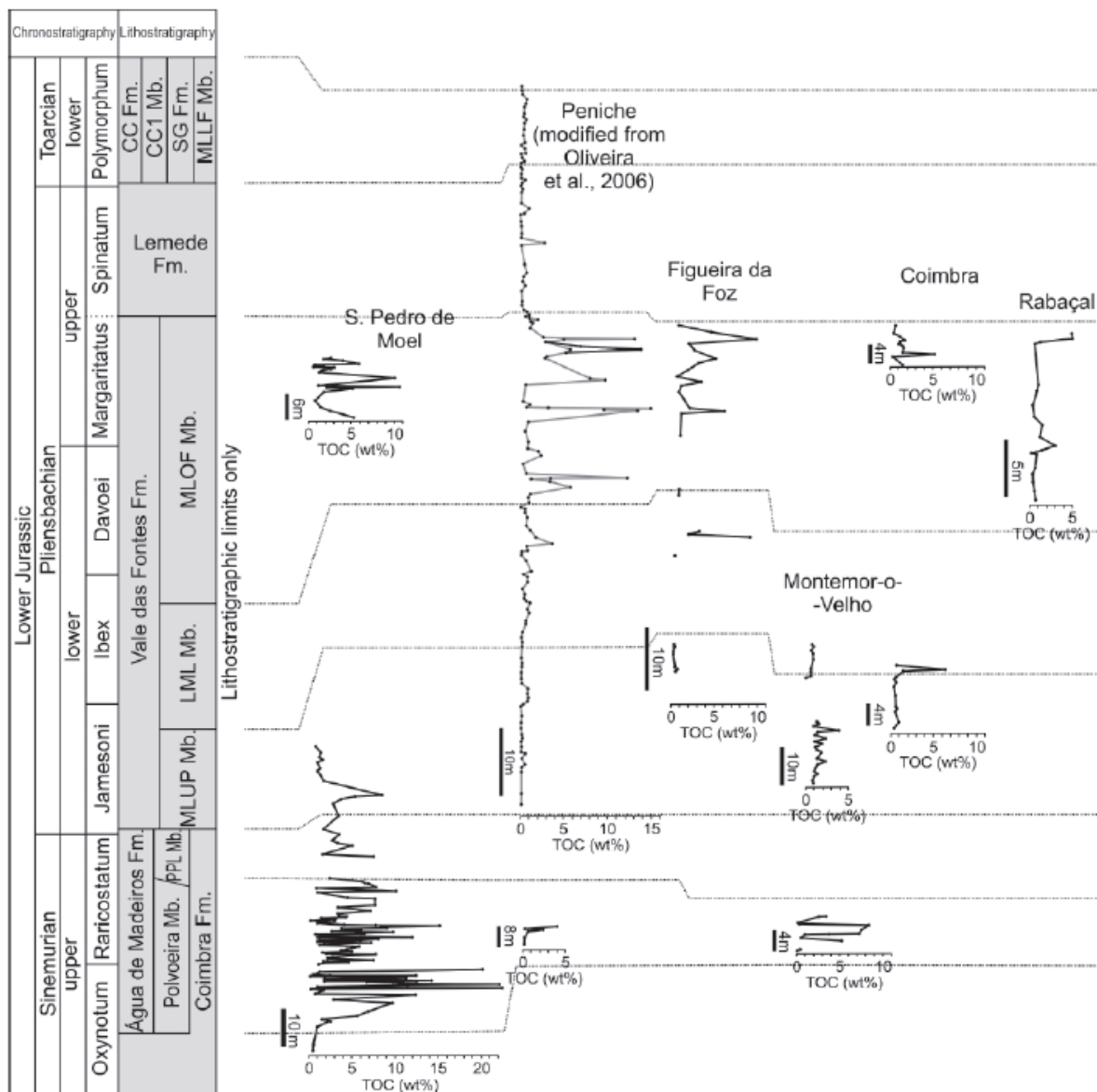


Fig. 38. Répartition du TOC des principales sections du bassin Lusitanien (d'après [Duarte et al., 2010](#)).

.3.1.7 Synthèse

De manière générale, ces dépôts riches en matière organique vont de pair avec une sédimentation argilo-marneuse à marno-calcaire. Ces dépôts sont souvent attribués aux périodes transgressives des bassins. Les valeurs en TOC mesurées au sein d'un même intervalle de roche mère sont souvent très variables. La seule exception réellement notable concerne les dépôts du Toarcien inférieur (Baudin, 1989 ; Bassoulet et Baudin, 1994). Ces horizons sont attribués à des épisodes où la paléogéographie est structurée, où la sédimentation argilo-marneuse s'est effectuée en parallèle d'une production importante des organismes phytoplanctoniques et où des environnements anoxiques ont pu se développer.

Conclusion

Le Jurassique inférieur, couvrant une période de plus de 27 Ma, présente en Europe un système complexe évoluant au cours du temps. Il existe de nombreux cas isolés où le schéma majoritaire n'est pas applicable. Voilà cependant une esquisse générale :

Les bassins et micro-bassins sont nombreux et séparés par des hauts fonds ou des terres émergées à l'Hettangien. La paléogéographie évolue en suivant la grande transgression liasique et la structuration en horst et graben de cette région charnière dans l'ouverture de l'océan téthysien. Les dépôts s'approfondissent progressivement et les bassins sont de moins en moins isolés au fur et à mesure que le niveau marin augmente et que les seuils se retrouvent immergés. En parallèle la forte activité volcanique des grandes provinces ignées de l'époque va contribuer à réchauffer et humidifier le climat avec un fort effet de serre. Ces variations climatiques et du niveau marin se font de manière ponctuelle tout au long du Jurassique inférieur. Ces « pulsations » contribuent très largement à l'évolution des espèces vivantes et au faciès des dépôts sédimentaires. Les conditions favorables à de fortes productivités primaires et à la conservation de la matière organique sont à plusieurs reprises réunies. Au Toarcien inférieur la structuration des bassins et les conditions environnementales sont telles que des dizaines de mètres de sédiments marneux très riches en matière organique sont accumulés dans des conditions anoxiques dans la plupart des bassins. Il s'agit de la formation Schistes carton dans le bassin de Paris –et de ses équivalents dans l'Ouest de l'Europe– servant aujourd'hui de référence en matière de roche mère de type marin. La grande transgression liasique prend fin au milieu du Toarcien et la période de régression suivant marque la fin du Jurassique inférieur.

CHAPITRE 3 – APPROCHE SCIENTIFIQUE ET METHODOLOGIE

Introduction

Ce chapitre s'organise en trois parties détaillant l'approche scientifique et la méthodologie employées pour les études présentées dans les chapitres suivants.

La première partie rappelle la problématique soulevée dans ces travaux de thèse et l'approche scientifique adoptée. Ces aspects ayant déjà été abordés précédemment dans ce mémoire, l'accent est surtout mis sur les contraintes et nécessités techniques de l'approche naturaliste couplée à la modélisation numérique.

La deuxième partie présente la façon dont les données issues de la littérature, le traitement des données de subsurface, les acquisitions et études de terrain et les analyses en laboratoire ont été compilés et homogénéisés.

La troisième partie présente le modèle numérique utilisé, DionisosFlow Organic-Rich Sediments.

.1 Problématique et approche

L'approche numérique mise en avant dans le cadre de cette thèse a pour objectif d'apporter un aspect quantitatif aux hypothèses sur les processus de dépôt de la matière organique. Cette modélisation est dite « orientée processus », et cherche à simuler les facteurs clés de l'histoire de la matière organique en partant des équations décrites dans la littérature. Même si certaines équations sont empiriques, c'est le processus lui-même qui est simulé afin de tendre vers une réalité géologique, biologique et chimique ; à l'inverse des modèles stochastiques qui tentent de reproduire un résultat fini à partir de données statistiques. Là où un modèle conceptuel ou un modèle numérique stochastique peut être proposé sans chiffrer précisément tous les paramètres mis en jeu, un modèle numérique orienté processus ne peut pas s'affranchir de mesurer ces paramètres. Un important travail en amont est nécessaire afin de définir un cadre stratigraphique précis et les modalités chronologiques, morphologiques et lithologiques de la zone modélisée.

La première étape de ce travail consiste en une approche naturaliste rigoureuse sur le terrain et en carothèque complétée par une étude analytique en laboratoire. Cette étape est primordiale et permet d'intégrer et d'homogénéiser les données de la littérature de manière cohérente en s'efforçant de toujours construire les interprétations de l'histoire des bassins à partir des observations de terrain et des mesures de laboratoire. C'est avec ce socle de données certifiées qu'est élaboré et calibré le modèle numérique des bassins à partir duquel sont testées les hypothèses de la formation et du dépôt de la matière organique.

La modélisation numérique est ensuite effectuée en deux temps. La construction du modèle se fait d'abord par une étape de modélisation stratigraphique normale « classique ». L'évolution dans le temps et l'espace des bassins est reconstituée et simulée à partir des données issues de l'approche naturaliste. Les modèles issus de cette première étape sont calibrés à partir des

épaisseurs et des faciès. A ce stade, la matière organique n'est pas simulée même si de nombreux paramètres déjà présents dans le modèle « classique » (e.g. taux de sédimentation, bathymétries) vont influencer son histoire. Dans un second temps les processus liés à la matière organique sont intégrés. Plusieurs approches décrites dans les Chapitres 4, 5 et 6 ont été envisagées afin de définir les paramètres relatifs à ces processus. L'objectif est de déterminer l'influence des différents processus et d'apporter une réflexion sur les hypothèses proposées dans la littérature.

.2 Compilation des données

.2.1 Approche naturaliste

.2.1.1 Missions de terrain et en carothèque

Quatre missions de terrain et trois missions en carothèque ont eu lieu dans le cadre de ces travaux de thèse. Au total, 18 logs de terrain, 9 descriptions de carotte et 57 études de forages grâce aux diagraphies et aux descriptions ont été effectués (**Fig. 39**).

L'objectif triple était (1) d'avoir une idée précise des dépôts, de l'analogie terrain - données de puits, et de la façon dont les descriptions et interprétations de la littérature ont été élaborées, (2) de compléter les données déjà publiées par de nouvelles acquisitions, notamment pour définir les variations minéralogiques et de TOC à l'échelle du faciès, et (3) de définir le cadre paléoenvironnemental à partir de l'étude des associations de faciès et des données de puits.

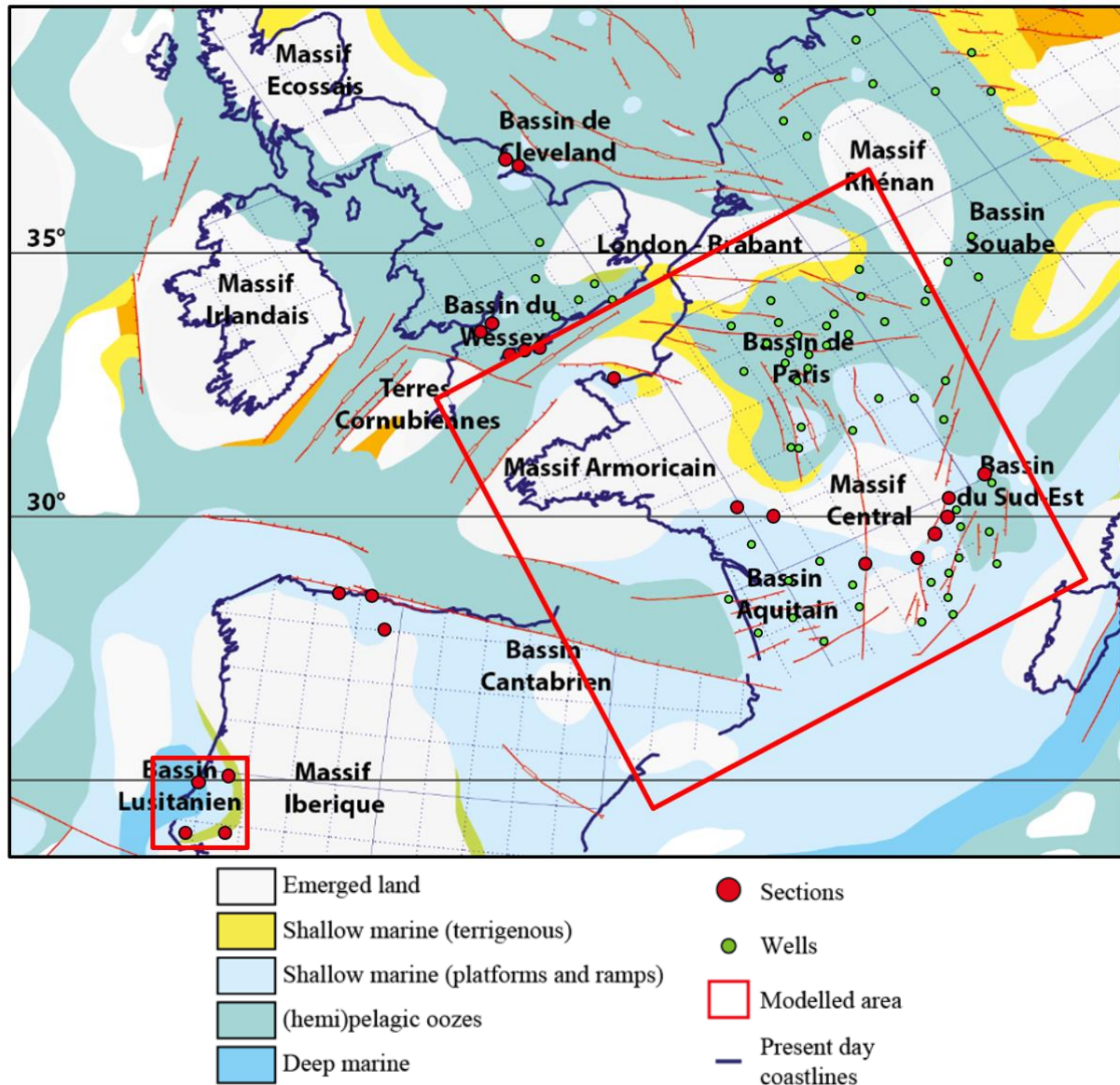


Fig. 39. Paléogéographie de l'Europe au Jurassique inférieur (modifié de [Thierry et al., 2000](#)) et position des affleurements (points rouges) et des puits (points verts) étudiés.

2.1.2 Modèle de dépôt

Cette partie définit le cadre paléoenvironnemental de la mise en place des séries du Jurassique inférieur européen et décrit le modèle de dépôt associé. Le modèle de dépôt est construit à partir des faciès observés sur le terrain précisément caractérisés et interprétés en termes de conditions environnementales (e.g. bathymétrie, niveau d'énergie, éclaircissement). Les faciès sont ensuite regroupés en associations typiques décrites sur le terrain. Le milieu de dépôt est déterminé à partir de ces associations de faciès.

La définition de faciès sédimentaires varie selon les sources. Dans la plupart des cas, le terme faciès désigne une catégorie de roche déterminée par un ou plusieurs caractères primaires lithologiques (lithofaciès) ou paléontologiques (biofaciès). Dans d'autre cas, le faciès désigne directement le caractère primaire observable. Dans cette étude le terme faciès est employé pour désigner un ensemble d'observations macroscopiques (macrofaciès comprenant : lithologie, texture, structure sédimentaire, clastes, biofaciès, ichnofaciès) et microscopiques (microfaciès

et nannofaciès). La juxtaposition de plusieurs faciès sédimentaires permet d'interpréter les conditions environnementales au moment du dépôt des sédiments. C'est à partir de ces associations de faciès qu'est déterminé le modèle de dépôt.

Le Jurassique inférieur est très largement dominé par une sédimentation marno-calcaire à l'échelle européenne. Les variations de proportion carbonate – argile, le contenu fossilifère et les figures sédimentaires (notamment liées à l'influence des vagues de beau temps ou de tempête) marquent les différences de bathymétrie au moment du dépôt. Le modèle de dépôt présenté ici (**Fig. 40**) est représentatif de l'ensemble des bassins étudiés. Dans les détails, d'autres faciès beaucoup moins majoritaires sont également présents. L'Hettangien peut par exemple, en fonction des bassins, présenter des faciès d'environnement continentaux ou marins très restreints. Des faciès d'environnements peu profonds marqués par des apports clastiques grossiers sont également notables sur certaines bordures de bassin.

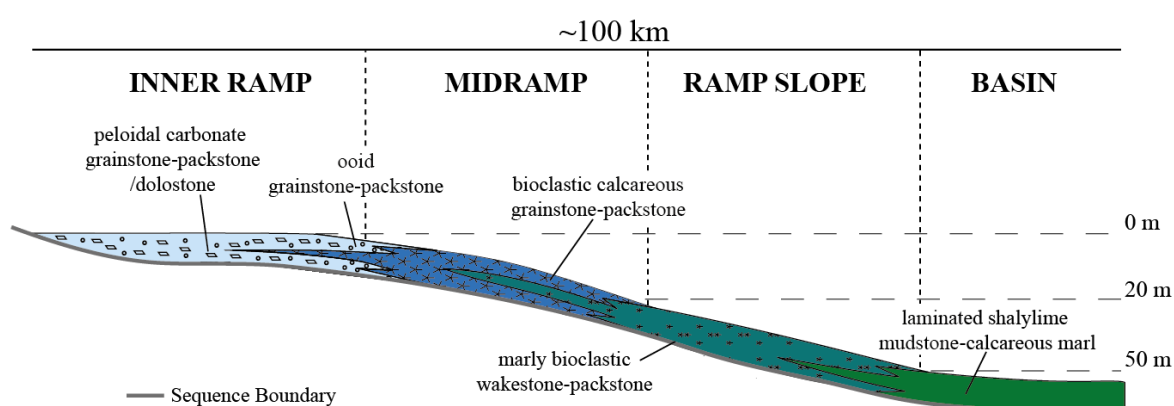


Fig. 40. Profil de rampe carbonatée (modifié de [Burchette et Wright, 1992](#)). La bathymétrie et le niveau d'énergie gouvernent le type d'environnement de dépôt. La rampe interne (Inner Ramp) correspond aux environnements très peu profonds avec potentiellement une forte énergie et des émergences. Les faciès les plus représentatifs sont des calcaires à dolomies parfois bioclastiques et remaniés par l'action des vagues. La rampe moyenne (Mid-Ramp) est un environnement peu profond transitionnel avec des faciès calcaires bioclastiques et bioturbés. La pente de la rampe (Ramp Slope) et le bassin (Basin) sont des environnements plus profonds sous la zone d'action des vagues de beau temps. La composante marneuse augmente avec la profondeur d'eau dans ces faciès d'alternances marno-calcaires.

.2.2 Analyses de laboratoire

Au total, plus de 350 analyses Rock-Eval 6 ont été effectuées sur des échantillons de terrain, de carottes ou de cuttings. Environ 250 analyses de diffractométrie au rayon X du sédiment brut (bulk) sur les mêmes échantillons ont été réalisées. Les résultats ont permis d'identifier les variations à haute résolution du TOC et de la minéralogie des faciès étudiés (**Fig. 41** et **Fig. 42**).

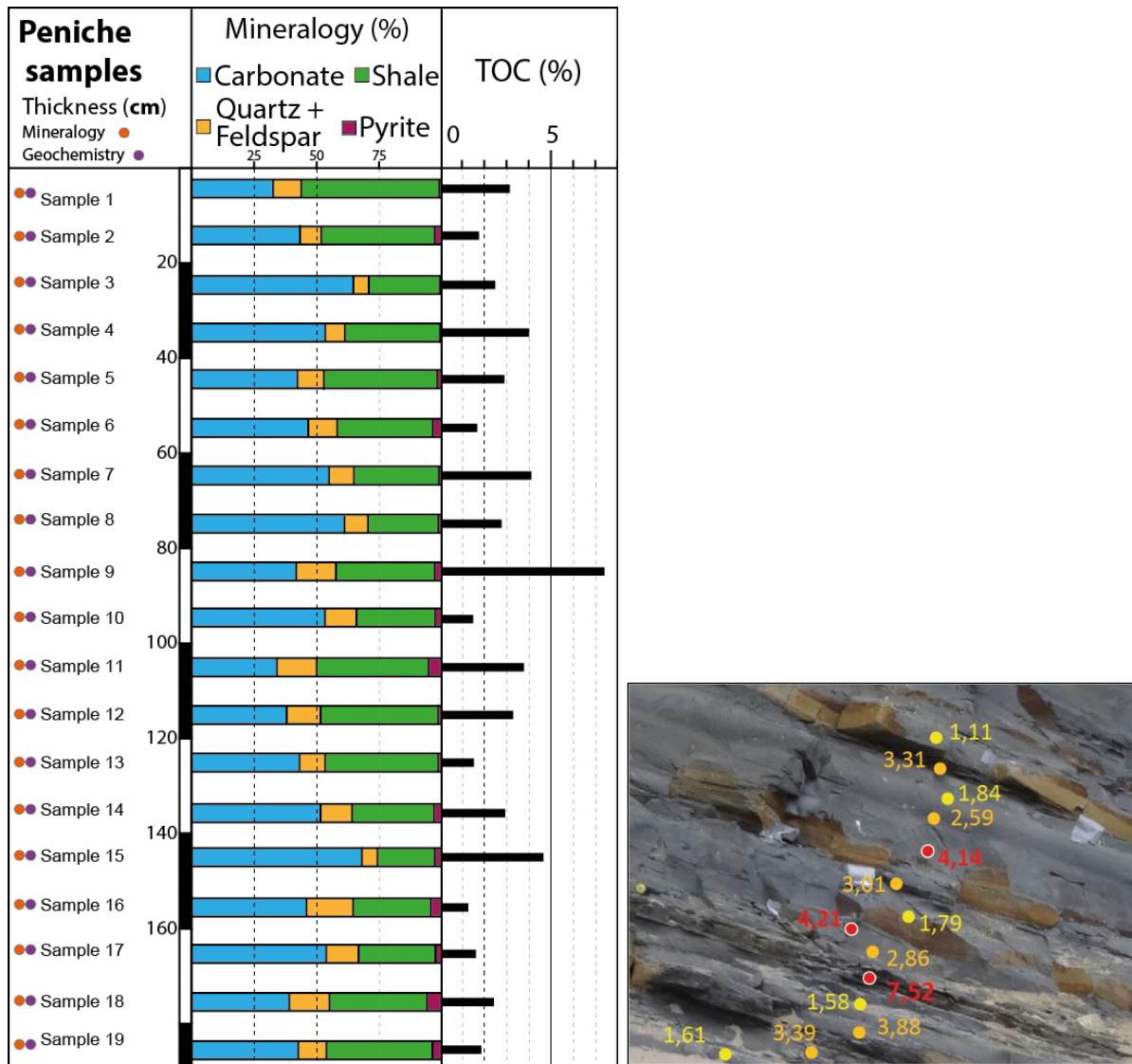


Fig. 41. Analyse de la minéralogie et du TOC sur un intervalle de 2 m dans la biozone à *Margaritatus* du Pliensbachien de la section de Peniche dans le bassin Lusitanien. Au sein de ce faciès de rampe profonde, les variations minéralogiques sont peu prononcées malgré la présence d'horizons black shales (échantillon 9). La photo montre l'affleurement où ont été prélevés les échantillons et les valeurs de TOC associées. L'horizon black shale (échantillon 9) correspond au point à 7.52 % de TOC.

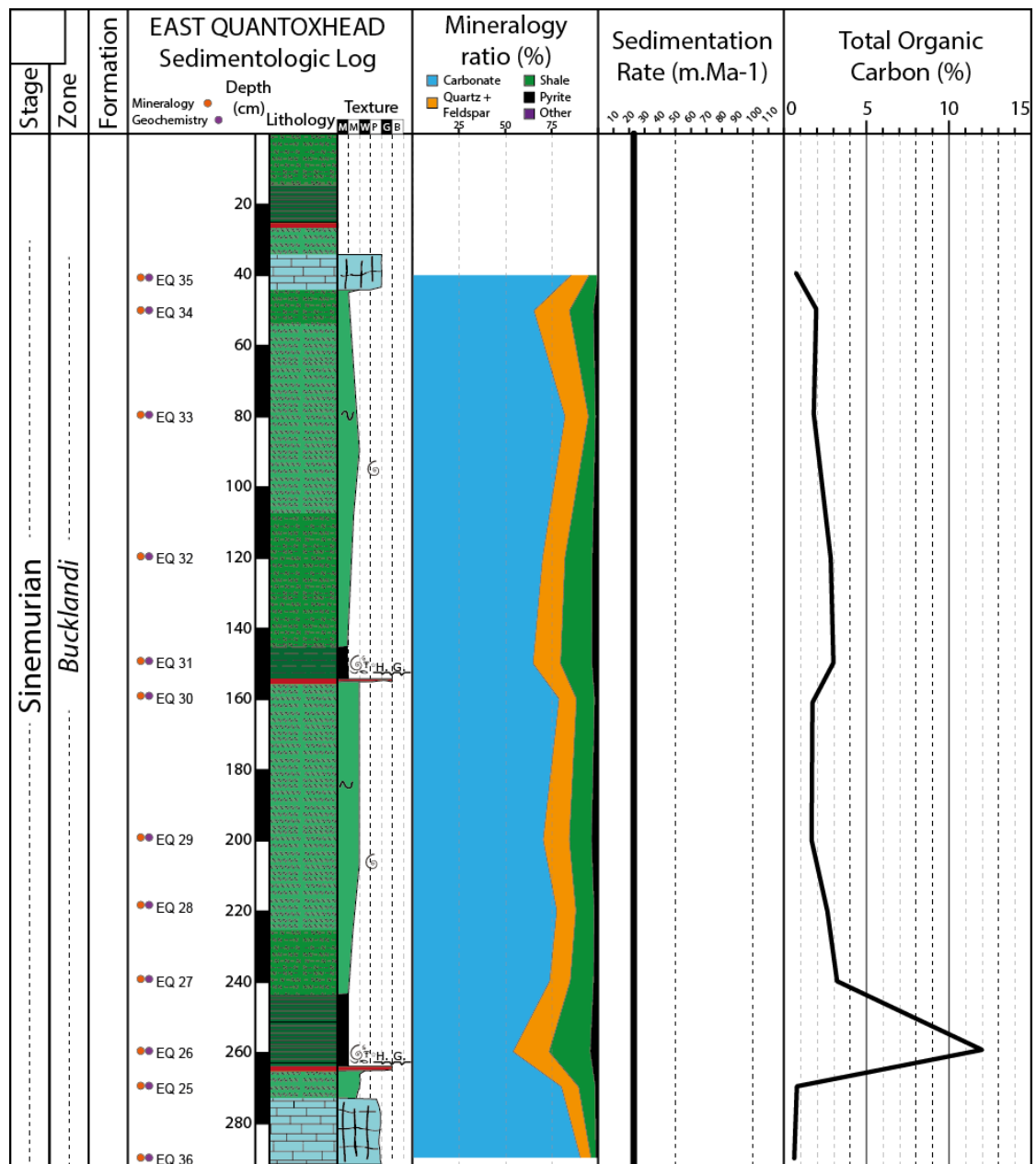


Fig. 42. Analyse de la minéralogie et du TOC sur un intervalle de 3 m dans la biozone à *Bucklandi* du Sinémurien de la section de East-Quantoxhead du bassin du Wessex. Les variations minéralogiques sont dans ce cas parfaitement corrélées avec les variations en TOC.

Les diagraphies de 22 puits en France et 28 puits en Allemagne ont été revus et digitalisés (sonic, densité et résistivité). Ces logs ont permis de compléter la base de données de la répartition de la matière organique en effectuant des analyses Carbollog.

.3 Modélisation numérique

.3.1 DionisosFlow

Le logiciel utilisé dans le cadre de la modélisation numérique 3D stratigraphique normale est DionisosFlow (Diffusion Oriented – Normal and Inverse – Simulation of Sedimentation) développé à l'IFP Energies Nouvelles sous la direction de D. Granjeon ([Granjeon, 1996, 2009](#) ; [Granjeon et Joseph, 1999](#) ; [Granjeon et Wolf, 2007](#)).

L'objectif de DionisosFlow est de reconstituer l'histoire des bassins sédimentaires sur de grandes échelles de temps (quelques dizaines à centaines de millions d'années) et d'espace (plusieurs dizaines à centaines de kilomètres). L'application du principe d'équilibre de masse et des lois de transport à grande échelle permet de reconstituer l'évolution en trois dimensions de la distribution des faciès, taux de sédimentation et d'érosion.

Cette modélisation stratigraphique normale est faite sur une période de temps donnée par pas de temps. A chaque pas de temps, trois facteurs sont quantifiés (**Fig. 43**) : (1) l'espace d'accommodation (égal à la subsidence + l'eustasie) qui correspond au cumul de la déformation relative du bassin et des variations eustatiques et qui permet de déterminer l'espace disponible pour les sédiments ; (2) l'apport ou la production de sédiment, qui correspond aux apports fluviaux (érosion des terres émergées adjacentes) et/ou à la production in situ de carbonates ; (3) le transport des sédiments, défini à partir des lois de transport à grande échelle des sédiments. Les taux de sédimentation et d'érosion sont ensuite calculés pour chaque cellule en utilisant le principe d'équilibre des masses ([Csato et al., 2013](#) ; [Granjeon, 2014](#)).

Dans les études présentées dans les chapitres suivants, la construction des modèles a été effectuée par un procédé d'essais-erreurs afin de calibrer les simulations en épaisseur et en distribution des faciès à partir des données issues de l'étude naturaliste.

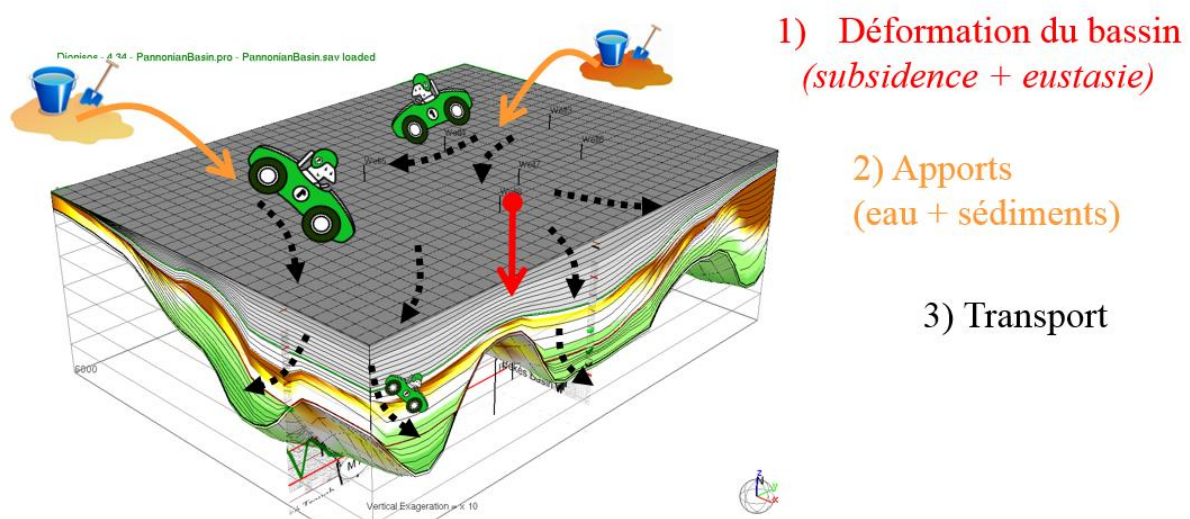


Fig. 43. Facteurs quantifiés à chaque pas de temps du modèle DionisosFlow (modifié de [Chauveau, 2014](#)).

.3.2 DionisosFlow Matière Organique

Le module DionisosFlow Organic-Rich Sediments est utilisé afin de modéliser les processus à l'origine de la distribution et des hétérogénéités de la matière organique au cours du temps et dans l'espace. Ce module est en actuellement en développement à l'IFP Energies Nouvelles (Granjeon et Chauveau, 2014).

Ce module permet d'ajouter les paramètres pour simuler les processus gouvernant la production, l'accumulation et la préservation de la matière organique marine dans un modèle DionisosFlow classique. Un certain nombre de ces paramètres sont déjà fournis par l'approche de modélisation stratigraphique normale (e.g. bathymétrie, morphologie du bassin, taux de sédimentation) ; les paramètres supplémentaires sont :

- la productivité primaire
- le flux de carbone
- le transport de la matière organique
- le niveau d'oxygène
- l'efficacité d'enfouissement (qui correspond à la dégradation sur les premiers mètres d'enfouissement).

Tous ces paramètres et processus sont basés sur des lois, équations et observations empiriques décrites dans cette partie.

.3.2.1 Productivité primaire

Le phytoplancton et autres producteurs primaires dans la zone photique représentent la principale source de matière organique marine. La production photosynthétique de cette matière organique est appelée production primaire car il s'agit de la première étape de la chaîne alimentaire marine. L'énergie chimique convertie de la lumière par photosynthèse est utilisée pour synthétiser la matière organique depuis le dioxyde de carbone, l'eau et les nutriments (Falkowski et Raven, 2007). Ce processus est donc dépendant de la disponibilité en nutriment, elle-même dépendante de nombreux processus (e.g. climat, upwelling, couvert végétal, morphologie de la zone de drainage, décharge fluviale). Il est difficile d'avoir des mesures précises de la production primaire comme décrit dans le **CHAPITRE 1**. Les observations actuelles fournissent des approximations empiriques.

Dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments, la production de matière organique marine est définie par une productivité primaire à la surface de l'eau. Cette dernière correspond au total de carbone fixé par le phytoplancton et autres producteurs primaires (carbone converti en matière organique) moins le carbone nécessaire à la respiration. Elle est exprimée en $\text{gC.m}^{-2}.\text{an}^{-1}$. Les valeurs et la distribution de cette productivité primaire est imposée par l'utilisateur afin de simuler les hypothèses de disponibilité en nutriment. La productivité primaire peut atteindre des valeurs supérieures à $1000 \text{ gC.m}^{-2}.\text{an}^{-1}$ dans les zones d'upwelling actuelles. Cependant, des valeurs plus faibles (de l'ordre de $200 \text{ gC.m}^{-2}.\text{an}^{-1}$ et une diminution avec l'éloignement à la côte) semblent être plus représentative des valeurs moyennes sur de grandes échelles de temps (e.g. Berger et al., 1989 ; Pilson, 2012 ; Sathyendranath et Platt, 2013).

Actuellement, la productivité primaire dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments est modélisée à partir d'une loi empirique basée sur la distance à la côte. La valeur maximum au niveau de la ligne de rivage et les paliers successifs de diminution sont déterminés par l'utilisateur. Des cartes de production primaire variant dans le temps sont actuellement en cours de développement et permettront de simuler des processus comme les upwellings ou les efflorescences algales.

.3.2.2 Flux de carbone

Après la production primaire, les particules organiques sont exportées vers le fond marin (e.g. [Martin et al., 1987](#) ; [Berger et al., 1989](#) ; [Honjo et al., 2008](#)). La densité de ces particules étant proche de celle de l'eau, leur export au travers de la colonne d'eau est relativement lent. Pour cette raison, l'export de la matière organique vers les fonds marins est principalement lié à son association avec des minéraux sous la forme d'agrégats organo-minéraux ou à son rejet sous forme de pelote fécale par le zooplancton. Cet export depuis la zone photique est sujet à la consommation par le reste des organismes de la chaîne alimentaire. Le « flux de carbone » fait référence à la fraction de la productivité primaire nette qui n'est pas consommée et qui est exportée vers les fonds marins. Ce flux de carbone (FC) est calculé grâce à la loi proposée par [Martin et al. \(1987\)](#) :

$$FC \text{ (gC.m}^{-2}\text{.an}^{-1}\text{)} = 0.409 PP^{1.41} (z/100)^{-n}$$

Avec FC le flux de matière organique exporté ($\text{gC.m}^{-2}\text{.an}^{-1}$), PP la productivité primaire ($\text{gC.m}^{-2}\text{.an}^{-1}$), z la bathymétrie et n supposé constant et égale à 0.86, bien que des études récentes aient montré que n est probablement lié aux conditions redox ([Berelson, 2001](#)). Cette équation est calibrée à partir des flux de matière organique mesurés par [Martin et al. \(1987\)](#). Le flux de carbone en fonction de la productivité primaire et de la bathymétrie est présenté **Fig. 44**.

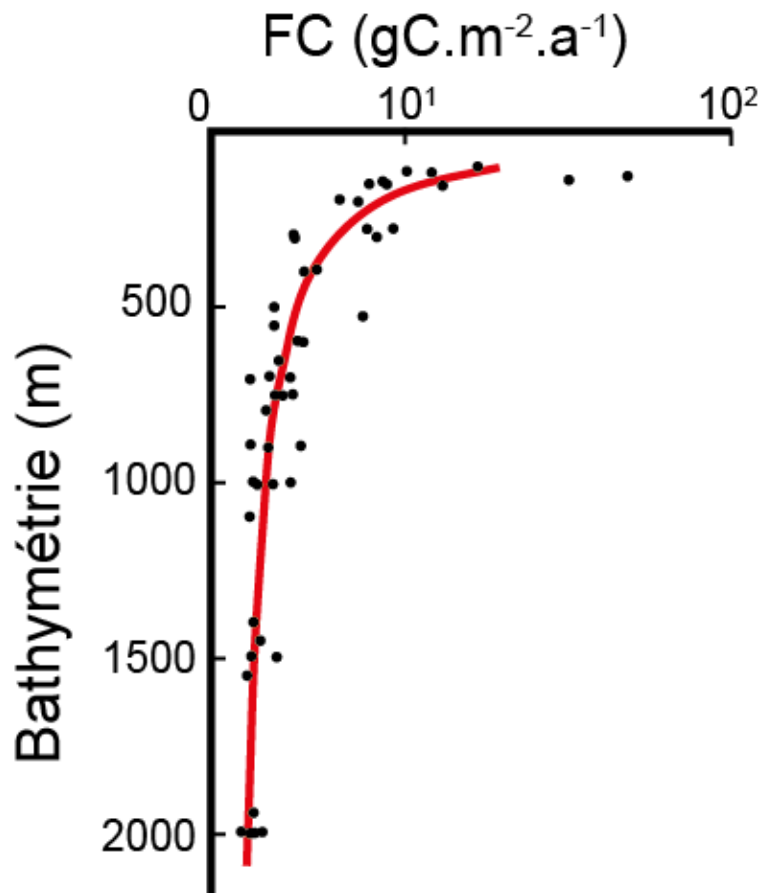


Fig. 44. Flux de carbone organique pour l'océan ouvert (modifié de [Martin et al., 1987](#)).

.3.2.3 Transport

Quand la matière organique résiduelle atteint l'interface eau-sédiment, elle peut être transportée. Ce transport est modélisé à partir de l'équation « bedload » utilisée dans DionisosFlow pour les sédiments non-organiques (Granjeon, 1996). Les caractéristiques de sédiments fins (silt/argile) sont utilisées pour le transport de la matière organique résiduelle (Schieber et al., 2007).

.3.2.4 Niveau d'oxygène

Le niveau d'oxygène dans les sédiments permet de déterminer le type de respirations des organismes benthiques et influe donc sur la conservation de la matière organique résiduelle. Les micro et macro-faunes aérobies sont plus efficaces pour la dégradation de la matière organique que la micro-faune anaérobie (e.g. Bastviken et al., 2004). De manière générale, la dégradation la plus efficace a lieu en milieu oxygène. Par contraste, des conditions de faible oxygénation jouent en faveur de la conservation de la matière organique. A l'échelle globale, la déplétion en oxygène n'est pas un état d'équilibre et la colonne d'eau est constamment approvisionnée en oxygène par diffusion depuis l'atmosphère et/ou par la circulation océanique. La déplétion en oxygène est principalement liée à deux phénomènes : une consommation intensive de l'oxygène par les consommateurs de producteurs primaires supérieure au taux de renouvellement de l'oxygène (Garrett, 1991), ou une isolation de la tranche d'eau des zones d'approvisionnement en oxygène (Jenkyns, 2010). Dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments, une équation d'équilibre entre le taux de renouvellement de l'oxygène et celui de sa consommation permet de déduire le niveau relatif de déplétion de l'oxygène. Actuellement, le niveau d'oxygène est calculé sans prendre en considération les courants marins.

Grâce à cette équation basée sur les travaux de Mann et Zweigel (2008), il est possible de différencier les zones de faible oxygénation (faible taux de mélange et/ou forte consommation de l'oxygène) et les zones de condition redox élevées (fort taux de mélange et/ou faible consommation de l'oxygène). Le niveau d'oxygène à l'interface eau-sédiment est exprimé par une valeur sans dimension allant de 0 (environnement totalement anoxique) à 1 (environnement complètement oxygéné) (Fig. 45). Il est déterminé selon un profil vertical défini à partir d'un niveau d'oxygène en surface, de la productivité primaire et d'un coefficient de mélange en profondeur :

$$\frac{dOx_z(z)}{dt} = A_z(z).Ox_{REF} - D_z(z).Ox_z(z)$$

Avec Ox_z le niveau d'oxygène à l'interface eau sédiment, $A_z(z)$ le coefficient de mélange, Ox_{REF} le niveau d'oxygène de référence et $D_z(z)$ la consommation d'oxygène lié à la dégradation de la matière organique par les organismes (et donc fonction du flux de carbone).

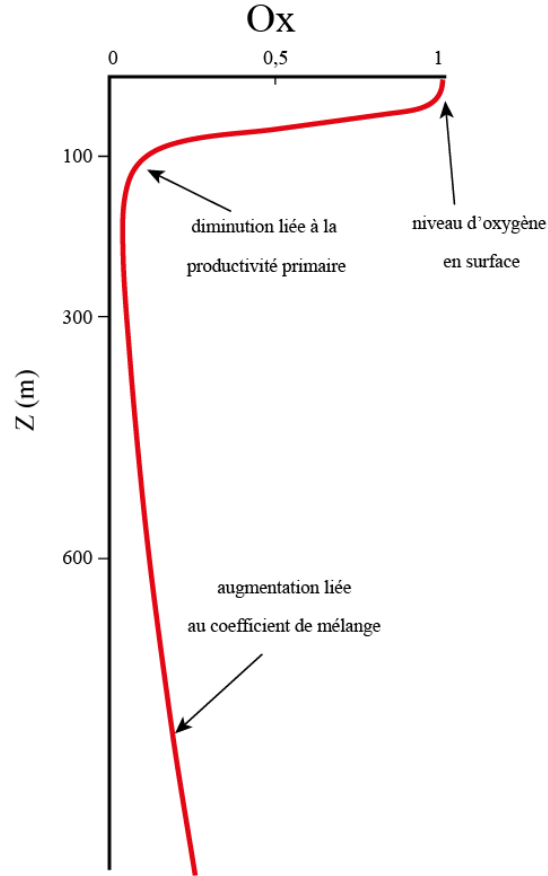


Fig. 45. Niveau d'oxygène à l'interface eau sédiment (Ox) en fonction de la bathymétrie. Les variations sont calculées à partir de la productivité primaire et du coefficient de mélange.

3.2.5 Efficacité de l'enfouissement

La matière organique résiduelle atteignant le sédiment (flux de carbone) est enfouie. La quantité de matière organique préservée après les premiers mètres d'enfouissement (i.e. diagenèse précoce) est appelé efficacité d'enfouissement. Cette dernière est principalement contrôlée par le taux de sédimentation (Betts et Holland, 1991) et les conditions redox du milieu (Tyson, 1995). Dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments, l'efficacité d'enfouissement (Fig. 46) est calculée à partir du taux de sédimentation fournis par le modèle stratigraphique normal et par le niveau d'oxygène décrit précédemment :

$$\frac{dC_{org}}{dt} = -k.C_{org}^n \longrightarrow S \frac{dC_{org}}{dz} = -k.C_{org}^n$$

Avec C_{org} la quantité de carbone organique disponible, k le coefficient de dégradation et S le taux de sédimentation. Avec k dépendant de la profondeur dans le sédiment ($k = k_0 e^{-z/z_0}$).

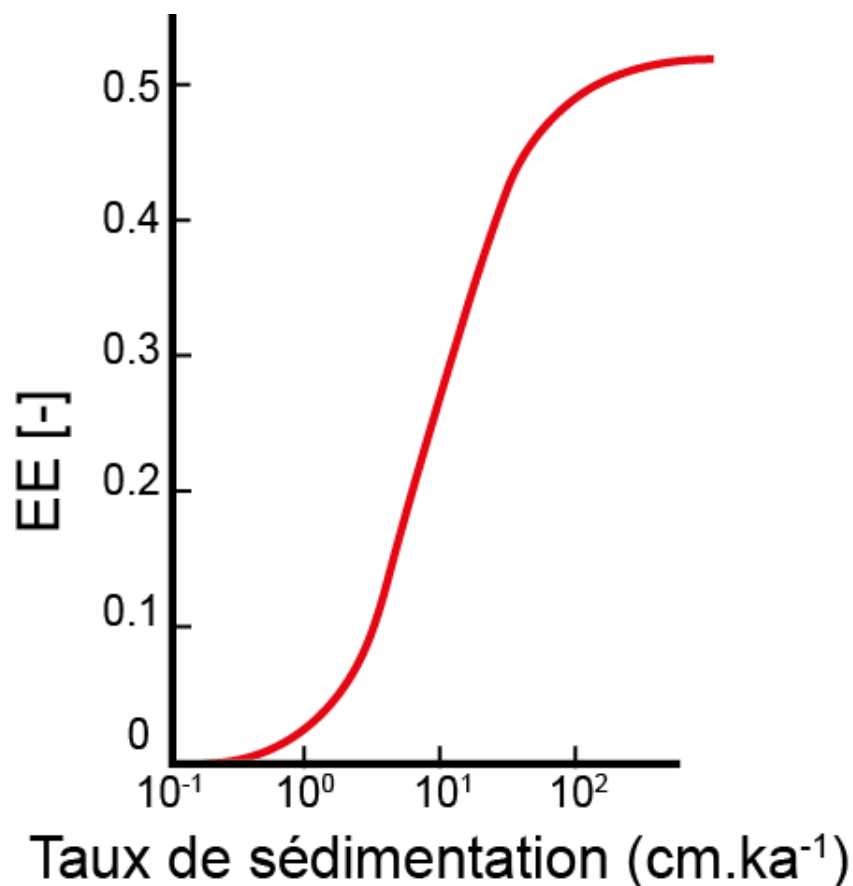


Fig. 46. *Effacité d’Enfouissement (EE) en fonction du taux de sédimentation dans le cas d’un milieu oxygéné (modifié de [Betts et Holland, 1991](#)).*

3.2.6 Calcul du TOC

La matière organique résiduelle préservée de la dégradation est ensuite diluée dans le sédiment en fonction de sa quantité et du taux de sédimentation. Le TOC calculé à partir de cette approche numérique représente le contenu en matière organique marine après les premiers mètres d’enfouissement (TOC initial, sans évolution de la température et de la biodégradation en profondeur).

3.2.7 Limites

Cette approche de modélisation numérique stratigraphique normale intégrant les processus liés à la matière organique comporte certaines limites et contraintes. Ces aspects sont abordés en détails dans les différents cas d’étude proposés dans les **CHAPITRE 4**, **CHAPITRE 5** et **CHAPITRE 6**, et discutés en profondeur dans le **CHAPITRE 7**.

CHAPITRE 4 – ETUDE DU BASSIN LUSITANIEN

Introduction

L'objectif de la première étude de ces travaux de thèse est de hiérarchiser les processus régissant la distribution et les hétérogénéités de matière organique marine dans les dépôts sédimentaires à partir d'un set de données succinct. Le bassin Lusitanien a été retenu pour effectuer cette première étude.

Situé au centre du Portugal, ce petit bassin présente plusieurs affleurements de qualité enregistrant une partie importante du Jurassique inférieur et répartis entre les domaines proximal et distal. De nombreuses études ont été publiées et apportent une description précise de la lithologie et un cadre chronostratigraphique très détaillé grâce à la faune en ammonite très abondante. De plus, plusieurs horizons riches en matière organique ont été relevés et analysés afin de déterminer les TOC et l'éventuelle contribution continentale.

L'accès aux affleurements, le cadre stratigraphique rigoureux et la présence de plusieurs niveaux roche mère en font un cas idéal pour tester le modèle numérique simulant les processus contribuant à la sédimentation et à la conservation de matière organique.

.1 3D Numerical Modelling of Marine Organic Matter Distribution: example of the Early Jurassic sequences of the Lusitanian Basin (Portugal)

Article 1, accepté le 15 juillet 2016 dans le journal **Basin Research**.

3D numerical modelling of marine organic matter distribution: example of the early Jurassic sequences of the Lusitanian Basin (Portugal)

Benjamin Bruneau,^{*,†} Benoit Chauveau,[‡] Luis Vitor Duarte,^{§,¶} Guy Desaubliaux,[†] Isabelle Moretti[†] and François Baudin^{*}

^{*} UPMC Univ Paris 06, CNRS, Institut des Sciences de la Terre de Paris (ISTeP), Sorbonne Universités, Paris, France

[†] ENGIE, Paris, France

[‡] IFP Energies Nouvelles, Rueil-Malmaison, France

[§] Departamento de Ciências da Terra, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal

[¶] MARE, Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal

ABSTRACT

Due to the multiple controlling factors involved, it is a challenging task to identify and quantify the processes influencing the distribution and heterogeneity of marine organic-rich rocks. To improve our understanding of these deposits, we model their burial history and stratigraphic evolution as well as processes linked to marine organic matter history throughout the Lower Jurassic in of the Northern Lusitanian Basin (Western Iberian Margin). This 15-Ma-long interval is modelled using 100-kyr time steps to simulate lithologies and organic matter heterogeneity as layers with a thickness of 2–5 m, depending on the sedimentation rate in the basin. The model is calibrated by well and outcrop data which provide structural and biostratigraphic constraints, as well as information on the depositional facies and geochemistry of the sediments. The results show that the presence of organic-rich intervals is linked to first-order variations in the basin geometry and sedimentation rates. Without considering any variation of primary productivity or oxygen content in surface sea waters, the parameters of basin geometry and sedimentation rate are sufficient to predict the main characteristics of source rocks, i.e. their occurrence, thickness and mineralogy at the basin scale. However, to fit the measured organic carbon contents, we need to take account of other parameters such as variations of primary productivity or changes in dissolved oxygen concentration.

INTRODUCTION

Over the last few decades, many studies have focused on processes leading to the distribution and heterogeneity of organic matter in time and space (e.g. Wignall, 1994; Tyson, 1995; Mann & Zweigel, 2008; Zonneveld *et al.*, 2010). Several attempts have been made to model organic matter distribution based on well-log analyses (Passey *et al.*, 1990; Carpentier *et al.*, 1991), to provide an estimation of organic matter distribution in one dimension at the well position. As organic matter has a low density, a high resistivity and a low sonic velocity (and, eventually, a high gamma-ray count associated with radioactive uranium), its presence can influence the log responses. However, downhole logging does not provide information on organic matter quality and allows only simple local predictions. Process-oriented calculations based on primary productivity, bathymetry and sedimentation rate

(Schwarzkopf, 1993) result in a more accurate estimate of organic matter quality, but such an approach cannot determine the spatial distribution. Many integrated studies allow a description of the spatial variations of organic matter and its associated quality by using a stratigraphic framework to create conceptual models (e.g. Katz & Pratt, 1993; Pasley *et al.*, 1993; Bessereau *et al.*, 1995; Tyson, 1996; Mann & Stein, 1997). The conceptual models so obtained favour the combination of classical stratigraphic and organic matter modelling (e.g. Tetzlaff, 1989; Carpentier *et al.*, 1993; Nordlund, 1996; Steckler *et al.*, 1996; Syvitski & Hutton, 2001; Mann & Zweigel, 2008). Although much research has been carried out so far, more studies are required to ascertain the effects and quantify the processes controlling organic matter distribution and heterogeneity.

To identify and quantify the relative impacts of these processes using numerical modelling, we focus on an approach which combines the time-evolution of primary production and dissolved oxygen levels. The case study presented here is based on the Lower Jurassic of the Northern Lusitanian Basin (Portugal) (Fig. 1). This basin

Correspondance: Benjamin Bruneau, UPMC Univ Paris 06, CNRS, Institut des Sciences de la Terre de Paris (ISTeP), Sorbonne Universités, 4 place Jussieu 75005 Paris, France. E-mails: benjamin.bruneau@upmc.fr or m.bruneau.b@gmail.com

contains some organic-rich horizons and is well suited to provide a good calibration for the model because of the large amount and quality of the data available on the region. These data include descriptions of facies and depositional environments of the Northern Lusitanian Basin (e.g. Duarte, 1997, 2007; Duarte & Soares, 2002; Duarte *et al.*, 2010; Figs 1 and 2). This basin is particularly well documented in terms of biostratigraphy (e.g. Mouterde, 1967; Duarte *et al.*, 2014a and references therein), which allows an accurate chronostratigraphic framework necessary for calibration of the model.

In this study, we use stratigraphic forward numerical modelling with DionisosFlow© Organic Rich Sediments software to reproduce the basin history and simulate

processes governing organic matter distribution and heterogeneity. This model is applied to ascertain the key factors of organic matter sedimentation and evaluate the distribution and heterogeneities of petroleum source rocks throughout the Northern Lusitanian Basin.

DATA SET AND METHODS

Data set

The study area covers a 150 km * 150 km block in the Northern Lusitanian Basin, bounded by the Aveiro Fault to the North, and extending southward into the Central Lusitanian Basin as far as Peniche (Figs 1 and 2). We focus on the Lower Jurassic deposits between the Upper Sinemurian and the Middle Toarcian. Our study is based on outcrop data comprising structural, biostratigraphic and sedimentological observations as well as geochemical analyses from our own investigations and numerous studies cited below. All these data are incorporated into a conceptual depositional model at the basin scale, using an accurate chronostratigraphic framework. The incorporation of these data allows us to calibrate the depositional model proposed here and provides a lithological/geochemical control.

In this study, we focus on four of the main outcrop sections of the Northern Lusitanian Basin: Peniche, São Pedro de Moel, Tomar and Rabaçal (e.g. Duarte & Soares, 2002; Duarte *et al.*, 2014b), which are used to calibrate our model (Fig. 1).

We use the results from several studies cited here and compiled in Duarte *et al.* (2010). We report the TOC contents of approximately 550 samples from eight key sections, chosen because of the occurrence of organic-rich facies, as well as on the basis of good biostratigraphic control and other stratigraphic and sedimentological criteria (e.g. petrographic and mineralogical composition). The organic-rich intervals were analysed in greater detail, as in the case of sections from Rabaçal, Coimbra, São Pedro de Moel and Peniche. The TOC contents of the samples were determined with a Leco SC-444 analyser at the Universidade do Estado do Rio de Janeiro and Cenpes-Petrobras (Brazil), with an analytical precision of $\pm 0.1\%$. The results are presented in weight per cent (wt %), a duplicate analysis being performed for every 10 samples analysed. The equipment was calibrated daily with standards, before starting analysis of the samples. As the analyses were performed on samples from outcrops subject to weathering, the organic geochemical data so obtained should be interpreted with caution.

3D FORWARD STRATIGRAPHIC MODELLING

In the present study, we use the DionisosFlow© 3D forward stratigraphic modelling software (Granjeon, 1996, 2009; Granjeon & Joseph, 1999; Granjeon & Wolf, 2007)

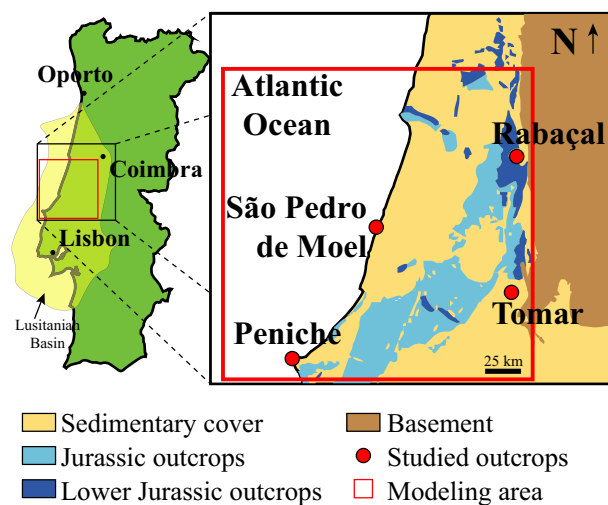


Fig. 1. Simplified geological map of the Lusitanian Basin with location of studied outcrops (red dots) and modelled area (red square) (modified from Silva *et al.*, 2011).

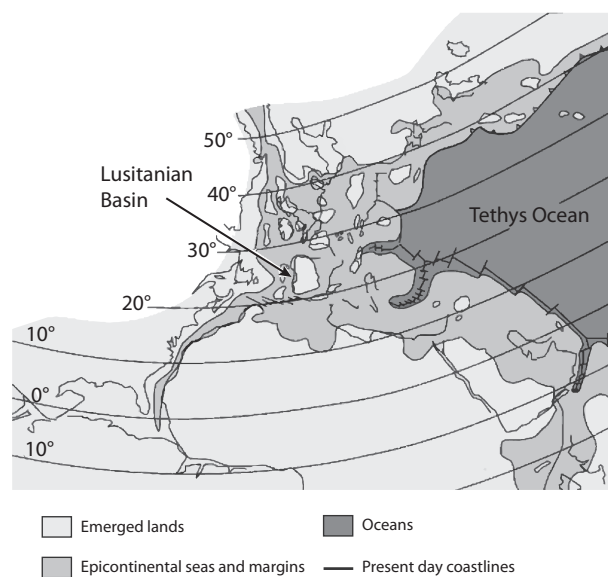


Fig. 2. Palaeogeography of the western margin of the Tethys Ocean during the Early Jurassic and location of the Lusitanian Basin (modified from Baudin *et al.*, 1990).

to reconstruct the stratigraphic history and palaeogeography of the Northern Lusitanian Basin during the Early Jurassic. DionisosFlow© simulates the evolution of basin geometry through time, using long-term and large-scale sediment transport equations. The results of this modelling include the facies distribution and time-evolution of sedimentation rates at the basin scale. By applying mass balance equations, we can use DionisosFlow© to define sedimentation or erosion rates at each point of the basin and at each time step, and thus simulate progressive basin deformation, which allows a quantification of the volumes of sedimentary bodies. A forward stratigraphic simulation is performed starting from a given age in a sequence of time steps. At each time step, three main “processes” are simulated and quantified: (1) accommodation (subsidence plus eustatic variations), which corresponds to the relative deformation of the basin and the resulting space available for sedimentation; (2) sediment supply, which may relate to fluvial input (erosion of adjacent emergent land masses) or to *in situ* marine carbonate production; (3) sediment transport, using macro-scale sediment transport laws. Sedimentation and erosion rates are then computed for each cell using mass balance equations (Csato *et al.*, 2013; Granjeon, 2014). The model built in this way is then calibrated using facies distribution and thickness. A description of this model is available in the section presenting the 3D forward stratigraphic modelling strategy.

Organic matter forward modelling

DionisosFlow© Organic-Rich Sediment is used here to investigate the variations and heterogeneity in organic matter distribution through space and time. This module adds new parameters to a classical DionisosFlow© 3D modelling approach in order to simulate the processes governing the distribution, accumulation and

preservation of marine organic matter. Some of the processes and parameters affecting the evolution of organic matter are presented in Fig. 3. Classical stratigraphic forward models allow us to determine most of these processes or parameters (e.g. water depth, morphology of the basin and sedimentation rate). The additional processes considered by DionisosFlow© Organic-Rich Sediment include: *primary productivity*, *carbon flux*, *organic matter transport*, *oxygen level* and *burial efficiency*, which account for degradation taking place in the topmost metre of buried sediment (Granjeon & Chauveau, 2014). All these processes and their associated parameters are based on empirical equations or observations, as summarized below. The numerical values used in our model are given in the section “Organic matter forward modelling results”.

Primary productivity

Phytoplankton, bacteria and archaea in the photic zone represent the predominant fraction of marine organic matter. The production of this organic matter by photosynthesis is called primary productivity because it is the first stage in the marine food chain. The chemical energy converted from light by photosynthesis is used to synthesize organic matter from carbon dioxide, water and nutrients (Falkowski & Raven, 2007). This process is dependent on nutrient availability, which is itself dependent on climate, upwelling, run off, vegetation cover and morphology of the catchment area. It is difficult to obtain accurate measurements of primary productivity or, in other words, the rate of organic matter synthesis. Present-day observations provide an empirically calibrated approximation.

In DionisosFlow© Organic-Rich Sediment, the production of marine organic matter is defined as the net

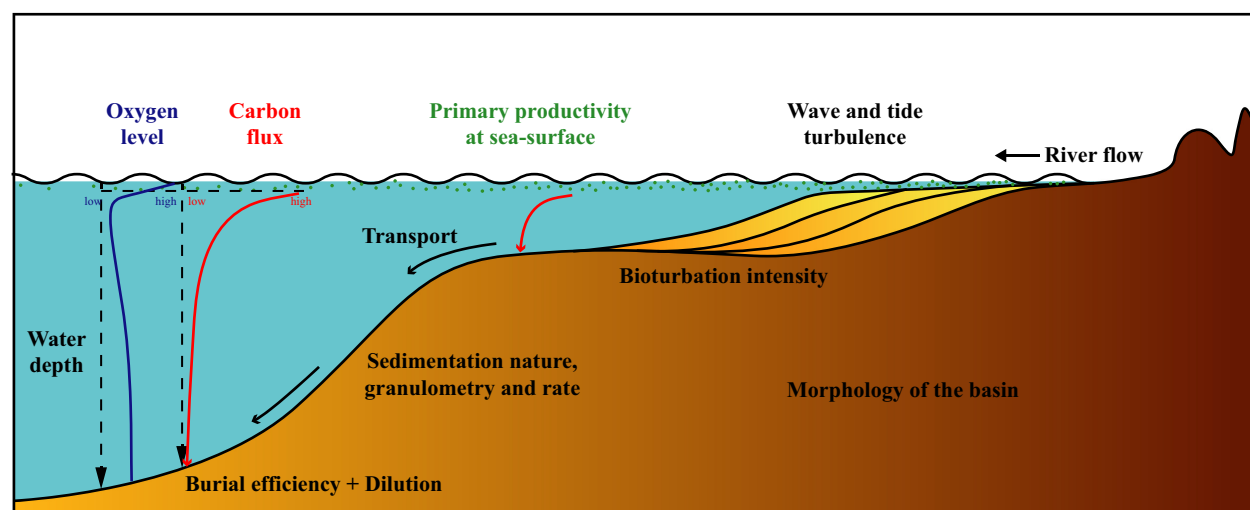


Fig. 3. Main processes affecting organic matter history, as simulated in DionisosFlow Organic-Rich Sediment (modified from Tyson, 1995). Primary productivity at the sea surface is the first step in the production of organic matter. The other parameters have an effect on transport, preservation/degradation, burial and dilution. Modelling of these processes allows us to compute a theoretical initial TOC after the first few metres of burial of the marine organic matter fraction.

primary productivity at the sea surface, which corresponds to the total amount of carbon fixed by phytoplankton (carbon converted into organic matter) minus the carbon needed for respiration. It is expressed in $\text{gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$. The relative distribution of primary productivity is imposed by the user to simulate scenarios of nutrient availability. The primary productivity can reach $800 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$ in present-day upwelling zones, but lower values (around $200 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$), which also decrease offshore, seem to be more representative on long time scales (e.g. Berger *et al.*, 1989; Pilson, 2012; Sathyendranath & Platt, 2013).

Carbon flux

After primary production, the organic particles sink to the seafloor (e.g. Martin *et al.*, 1987; Berger *et al.*, 1989; Honjo *et al.*, 2008). The density of these particles is close to that of seawater, so they settle slowly through the water column. Hence, the export of organic matter to the seafloor is mainly associated with the loading of organic matter and minerals in the form of aggregates or zooplankton faecal pellets. This organic matter, which is exported in the form of flocs settling from the photic zone, is partly consumed by other organisms in the food chain. “Exported production” refers to the fraction of “net primary productivity” that is not consumed and which is exported to the seafloor. The amount of exported production (Forg), which reaches the sediment/water interface, is determined from the Martin equation (Martin *et al.*, 1987):

$$\text{Forg}(\text{gC m}^{-2} \text{ yr}^{-1}) = 0.409\text{PP}^{1.41}(z/100)^{-n}$$

where “Forg” is the exported organic flux ($\text{gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$), “PP” is the primary productivity ($\text{gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$) and “n” is assumed to be constant and equal to 0.86. However, recent studies have shown that n is probably sensitive to redox conditions (Berelson, 2001). This equation is calibrated from organic flux measurements made at several depths in the East Pacific Ocean (Martin *et al.*, 1987).

Organic matter transport

Once the degraded organic matter in the form of flocs reaches the seafloor, its transport can be simulated using the bedload equations of DionisosFlow© for inorganic sediments. Following recent observations, the diffusion coefficient of silt is used to mimic the transport regime of flocs containing residual organic matter at the sediment/water interface (Schieber *et al.*, 2007).

Oxygen level

The oxygen level in sediments is one of the most important factors controlling the preservation of organic matter, as it determines the nature of respiration of benthic

organisms. Aerobic micro and macro-fauna are more efficient in degrading organic matter than anaerobic micro-organisms, as described by Bastviken *et al.* (2004) in fresh water environments. In general, the most efficient degradation of organic matter occurs under oxic conditions. By contrast, the presence of oxygen-poor conditions favours the preservation of organic matter. At a global scale, oxygen depletion is not a steady-state condition, and the water column is constantly being supplied in oxygen by diffusion from the atmosphere, as well as by ocean currents or the circulation of water masses. Oxygen depletion is mainly linked to two phenomena: a) the intensive oxidation of organic matter itself, which occurs at a faster rate than oxygen supply (e.g. Garrett, 1991), b) or the isolation of water layers from the oxygen supply area (e.g. Jenkyns, 2010). In DionisosFlow© Organic-Rich Sediment, a mass balance equation between oxygen renewal and oxygen consumption allows us to determine the relative oxygen depletion. This depletion is currently estimated without considering any water current so it is merely 1D (vertical). Based on the studies of Mann & Zweigel (2008), we can use this equation to differentiate local areas of low oxygen levels (low mixing rate and/or high primary productivity) from areas with higher redox potential (high mixing rate and/or low primary productivity). The oxygen levels are expressed in nondimensional units, with values varying from 0 (fully anoxic environment) to 1 (fully oxic environment). Oxygen variations can also be forced by the user to reproduce specific scenarios, such as confinement of the basin. In such cases, the absence of oxygen renewal from oceanic currents or water mass circulation can be simulated by reducing the oxygen level. In this way, we can simulate water stratification linked to a confined/silled basin configuration with high fresh water supply in a humid climate or high evaporation in an arid climate (Baudin *et al.*, 2007).

The SO_4^{2-} present in marine waters provides another electron acceptor for the degradation of organic matter. This dissolved sulphate probably contributes to the degradation of organic matter in anoxic environments. Other factors, such as metabolite inhibition, bacterial grazing and geopolymerization, also have an effect on organic matter preservation. Some of these factors are specific to euxinic environments (e.g. the accumulation of metabolites, the lack of bacterial grazers) and could enhance the preservation of organic matter (Canfield, 1993). In our study, we do not take account of this process as no quantification is available.

Burial efficiency

After sinking from the sea surface and transport at the sediment/water interface, the organic matter is finally buried. The amount of organic matter preserved after the first few metres of burial (i.e. during early diagenesis) is called burial efficiency; this parameter is mainly controlled by the sedimentation rate (Betts & Holland, 1991) and local redox conditions (Tyson, 1995). In

DionisosFlow© Organic-Rich Sediment, the burial efficiency is calculated using the sedimentation rate derived from stratigraphic forward modelling and the oxygen levels described above.

Total organic carbon

The organic matter preserved from degradation is diluted depending on the sedimentation rate. The Total Organic Carbon (TOC) obtained with this modelling approach represents the marine organic matter content after the first few metres of burial. In the following, “simulated TOC” refers to the initial marine TOC obtained with this modelling approach, whereas “measured TOC” refers to the TOC obtained by

laboratory analyses of field samples. Figure 4 gives some examples of sensitivity analyses according to variations in primary productivity, water depth and sedimentation rate. The following caveats should be taken into account when comparing the simulated TOC and measured TOC values:

- (1) Inputs of terrestrial organic matter are not simulated with DionisosFlow© Organic-Rich Sediment. Therefore, we require an estimation of the marine-to-terrestrial ratio in the measured TOC. The marine fraction of the measured TOC must be used for comparison with the simulated TOC.
- (2) Simulations with DionisosFlow© can be performed with or without sediment compaction. If sediment

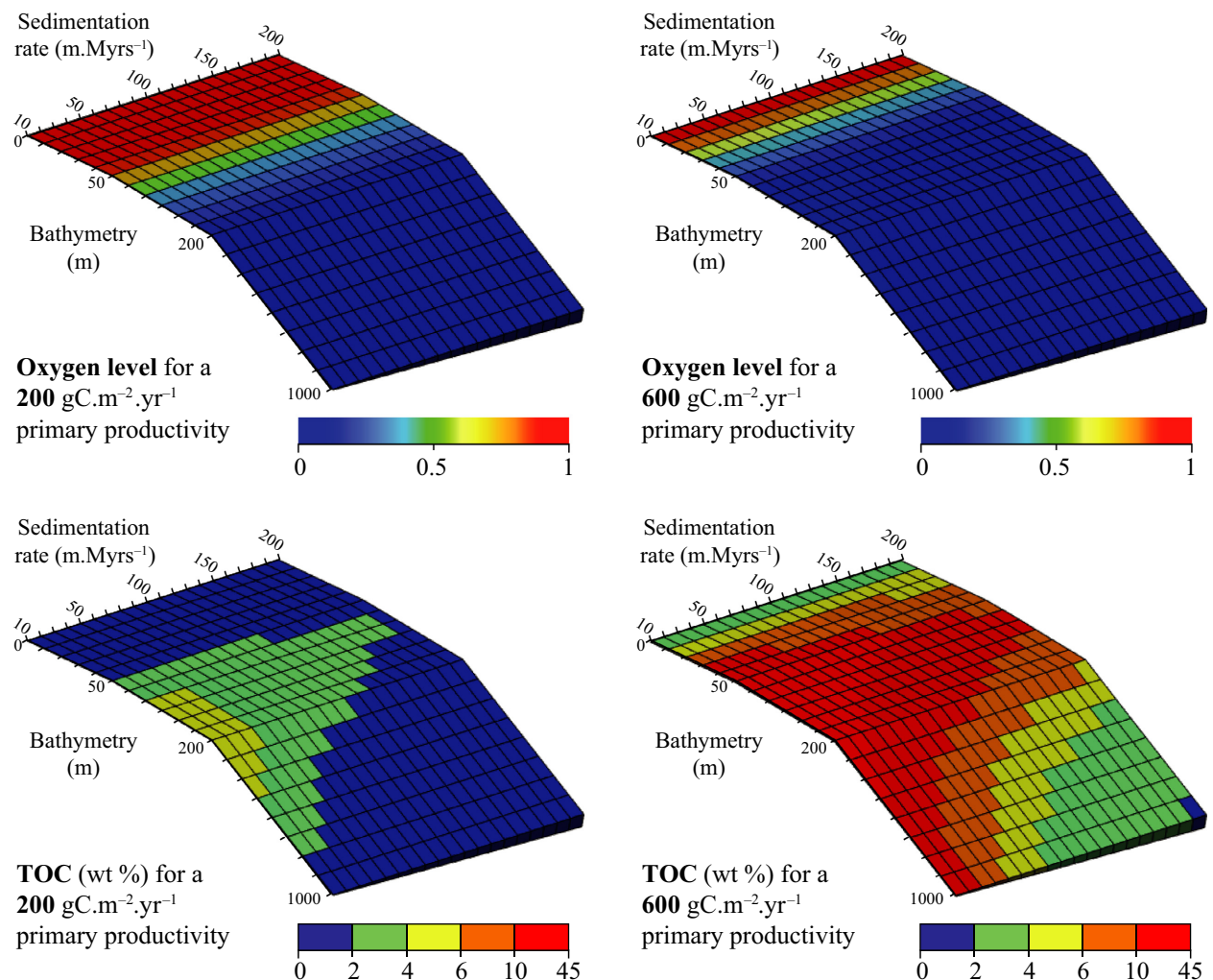


Fig. 4. Sensitivity analyses based on oxygen level and TOC distribution (the colour scales for TOC are not the same; the white cells represent TOC values that are lower than the first graduation of the scale). Note that the organic matter only settles from the sea surface to seafloor, and that no transport is simulated in these analyses. Two primary productivity values are tested (200 and 600 gC m⁻² year⁻¹) for sedimentation rates ranging from 10 to 200 m Ma⁻¹ and water depths ranging from 0 to 1000 m. Depletion in oxygen starts in shallower environments with higher primary productivity. Hence, the organic matter is better preserved in shallower parts of the basin leading to higher initial TOC. Low sedimentation rates lead to a weak dilution of organic matter and, therefore, a higher initial TOC. Only one exception is noted in parts of the basin with high oxygen levels, where a moderate sedimentation rate protects organic matter from degradation without causing excessive dilution, but this configuration has no visible impact at the scale of these sensitivity analyses.

compaction is not considered, the sedimentation rate is underestimated because it reproduces compacted thickness. This underestimation of sedimentation rate can lead to uncertainties in organic matter burial efficiency and dilution for sedimentary intervals showing burial and compaction on large scales. Compaction is not taken into account in our model because of the shallow burial and the similar lithology of organic-rich layers, which does not lead to differences in the sedimentation rate.

- (3) Thermal diagenesis, maturation and expulsion of organic matter are not simulated with DionisosFlow© Organic-Rich Sediment. The fraction of lost TOC associated with these processes should be estimated before comparing between simulated and measured TOC. This comparison can be easily performed with classical basin modelling tools or by data analysis (e.g. Romero-Sarmiento *et al.*, 2013).

GEOLOGICAL SETTING OF THE CASE STUDY

Structural setting

The Lusitanian Basin is a 300-km-long basin located in the western part of the Iberian Peninsula (Fig. 1). The major part of this 150-km-wide basin is located onshore. The development of the Lusitanian Basin during the Mesozoic is related to continental rifting that preceded the opening of the North Atlantic Ocean, and is associated with the early rifting phases recorded in most of the basins along this margin (e.g. Wilson *et al.*, 1989; Soares *et al.*, 1993; Leinfelder & Wilson, 1998; Rasmussen *et al.*, 1998; Reis *et al.*, 2000; Alves *et al.*, 2002; Azerêdo *et al.*, 2002, 2003). The basin is filled by ~5 km of late Triassic to Pliocene-Quaternary strata. The basal part is made up of red Triassic siliciclastic fluvial sediments, which are capped by evaporites of Hettangian age (e.g. Mauffret *et al.*, 1989). In the Northern Lusitanian Basin, the location and relative growth of halokinetic structures controlled the basin topography and influenced the facies distribution during Jurassic continental rifting (Alves *et al.*, 2006). Several diapirs are present in this area (e.g. São Pedro de Moel, Ereira and Caldas da Rainha diapirs, and the larger Monte-Real salt-wall), showing evidence of inversion and exhumation since the late Cretaceous (Rasmussen *et al.*, 1998; Alves *et al.*, 2003, 2009). However, these weakly deformed salt structures in the Lower Jurassic consist of flat layers that remain rather flat or just gentle pillows (Rasmussen *et al.*, 1998). The Lower Jurassic succession shows geometries indicating a westward-dipping homoclinal carbonate ramp, distally steepened, with evidence of faulting during the early Toarcian relating to activity of the Berlenga ridge and its northward continuation (e.g. Wright & Wilson, 1984; Duarte, 1997, 2007; Alves *et al.*, 2002, 2006).

Biostratigraphy

Several studies have provided a detailed biostratigraphic resolution for the Lusitanian Basin, based on the accurate interpretation of ammonite zones (e.g. Comas-Rengifo *et al.*, 2013; Duarte *et al.*, 2014a,b; Silva *et al.*, 2015), and an in-depth discussion on the worldwide distribution and endemism of ammonites (e.g. Mouterde, 1967; Mouterde *et al.*, 1981; Meister, 2010). Hence, the chronozone intervals and associated thicknesses used here are based on data from the International Commission on Stratigraphy (see Ogg & Hinnov, 2012) and from recent studies providing biostratigraphic constraints for West Iberia (e.g. Duarte & Soares, 2002; Duarte *et al.*, 2010, 2014a,b). Figure 5 shows the ammonite zone boundaries and their durations as assumed in the present study. The modelling applied here starts at 193.8 Ma (top Obtusum Zone) and ends at 178.2 Ma (top Bifrons Zone). Five time-lines are used to constrain the modelling: 190.8 Ma (top Raricostatum Zone), 187.6 Ma (top Davoei-Lavinianum Zone), 182.7 Ma (top Spinatum Zone), 180.4 Ma (top Levisioni Zone) and 178.2 Ma (top Bifrons Zone).

Depositional environment model

Previous studies have aimed to characterize the lithologies of Lower Jurassic formations of the Lusitanian Basin (e.g. Soares *et al.*, 1993; Leinfelder & Wilson, 1998; Azerêdo *et al.*, 2003; Duarte *et al.*, 2004). This interval is made up of alternating marls and limestone, suggesting the development of a homoclinal carbonate ramp on an epicontinental extensional basin influenced by eustatic variations and regional tectonics. The homoclinal ramp forms part of a west-dipping half-graben basin, bounded to the west by the Berlenga High and its continuation towards the North (Alves *et al.*, 2002; Duarte *et al.*, 2004). In the present study, the depositional model is built up from data analyses combined with previous observations from four key outcrops of the Northern Lusitanian Basin (Fig. 1). The subdivision of depositional environments used here is derived from Burchette & Wright (1992). In this model, the ramp is defined by a low-angle slope with facies variations reflecting energy gradients controlled by the water depth (Fig. 6). Figure 7 presents the outcrops used for calibration and their associated depositional environments.

Organic-rich facies characterization

The development of carbonate ramp systems in the Northern Lusitanian Basin led to the deposition of marly organic-rich intervals, as recorded in outcrops along the coast of central Portugal (e.g. Duarte & Soares, 2002; Duarte *et al.*, 2004, 2010, 2012; Oliveira *et al.*, 2006; Duarte, 2007; Silva *et al.*, 2011, 2012; Silva & Duarte, 2015). The organic-rich facies are similar throughout the Lower Jurassic of the Lusitanian Basin (Duarte *et al.*, 2010), corresponding to dark-grey marl-limestone

Chronostratigraphy and Ammonite Biozonation with basal age (Ma)				Lithostratigraphy					
				Tomar	Generality of the Basin		Peniche/S. Pedro de Moel		
Lower Jurassic	TOARCIAN	Middle	Gradata (178.2)	Prado Fm.	S. Gião Fm.	Marls and marly limestones with sponge bioconstructions	Cabo Carvoeiro Fm.	C. Carvoeiro 4	
			Bifrons (180.4)			Marls and marly limestones with <i>Hildaites</i> and <i>Hildoceras</i>		C. Carvoeiro 3	
		Lower	Levisoni (181.7)			Thin nodular limestones		C. Carvoeiro 2	
			Polymorphum (182.7)			Marly limestones with <i>Leptaena</i> fauna		C. Carvoeiro 1	
	PLIENSBACHIAN	Upper (Domerian)	Spinatum (183.5) Margaritatus (187.6)	Vale das Fontes Fm.	Vale das Fontes Fm.	Marly limestones with bituminous facies	Vale das Fontes Fm.	Marly limestones with bituminous facies	
		Lower (Carixian)	Davoei (188.5) Ibex (189.3)					Lumpy marls and limestones	Lumpy marls and limestones
			Jamesoni (190.8)					Marls & limest. with <i>Uptonia</i> and <i>Pentacrinus</i>	Marls & limest. with <i>Uptonia</i> e <i>Pentacrinus</i> Praia Pedra Lisa Mb.
		SINEMURIAN		Raricostatum (192.8) Oxynotun (193.8)	Coimbra Fm.	Coimbra Fm.	S. Miguel Beds	Água de Madeiros Fm.	Polvoeira Mb.

Fig. 5. Chrono/lithostratigraphic framework for the Sinemurian – lowermost Toarcian of the Lusitanian Basin (modified from Duarte & Soares, 2002; Duarte *et al.*, 2014a). Light-grey shaded interval corresponds to the studied units. The ages of the bases of ammonite zones (in brackets) are from Ogg & Hinnov (2012).

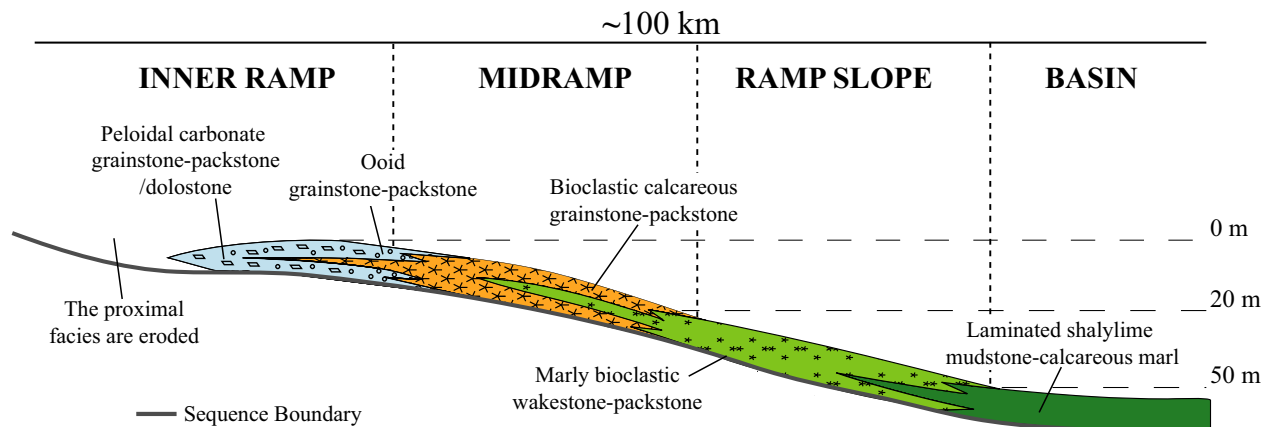


Fig. 6. Carbonate ramp (modified from Burchette & Wright, 1992). The inner ramp corresponds to a very shallow environment with potentially high energy and emergence. The most representative facies are coarse limestones to dolostones, which can be bioclastic or reworked by wave action. The mid-ramp is a transitional shallow environment with bioclastic and bioturbated limestone facies. Ramp Slope and basin are deeper environments below fair-weather wave base. The marly component increases with water depth in these alternating marl-limestone facies.

alternations. Black shale intervals can be observed up to 50-cm thick (Duarte *et al.*, 2004, 2010, 2012; Duarte, 2007; Silva *et al.*, 2011, 2012; Silva & Duarte, 2015). The two main organic-rich intervals correlate with the Late Sinemurian Oxynotum-Raricostatum Zone, and the earliest part of the Late Pliensbachian at the top of the Ibex to Margaritatus Zone (e.g. Oliveira *et al.*, 2006; Duarte *et al.*, 2010; Silva *et al.*, 2011). The Sinemurian interval shows total organic carbon (TOC) values that reach 22 wt % in two thin beds. The most commonly measured values

are around 5 wt % on a 30-m-thick interval, whereas frequent peaks higher than 10 wt % are documented in the São Pedro de Moel section (Plancq *et al.*, 2016). TOC values decrease in the proximal part of the basin, and only one thin horizon with a content of around 4 wt % is recorded in the Peniche section (see Duarte *et al.*, 2010, 2012).

The Pliensbachian interval yields TOC reaching 10–15 wt % in three main horizons at São Pedro de Moel and Peniche. The lowest values of around 1 wt % are recorded

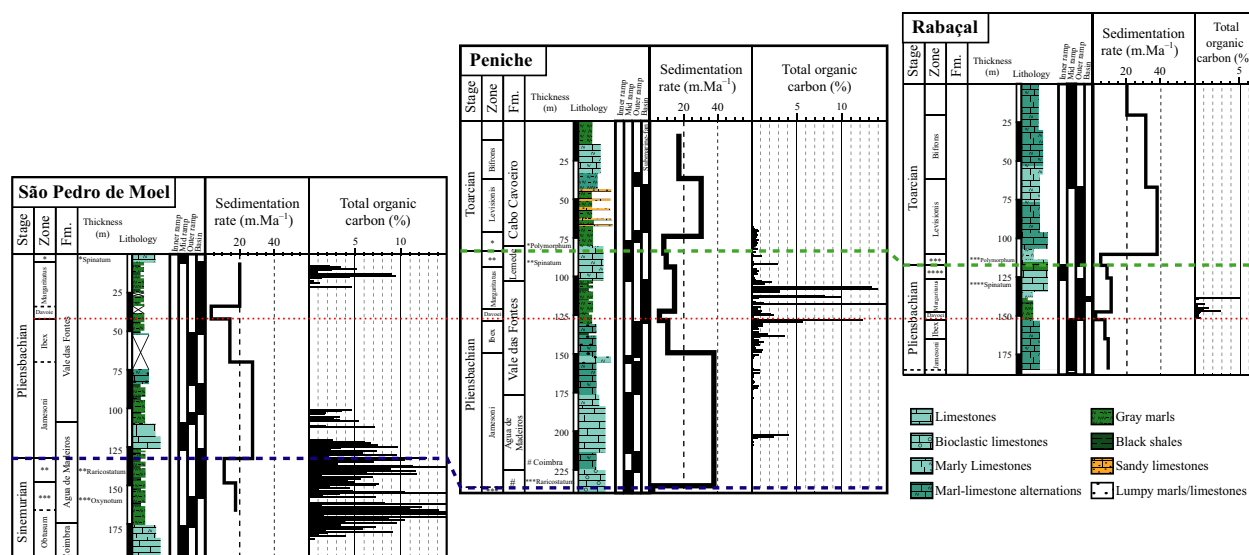


Fig. 7. Correlations between the Peniche, São Pedro de Moel and Rabaçal sections. Biozonations and TOC values are from previously cited studies (e.g. Duarte *et al.*, 2010, 2014a,b). Lithologies and depositional environments are characterized from previous studies (*op. cit.*) and our own field investigations. The sedimentation rates are determined from the thicknesses of units and the biozonation framework. The red dots indicate the base of the Davoei Zone (188.5 Ma). The blue dots indicate the Sinemurian/Pliensbachian boundary (190.8 Ma). No *Raricostatum* ammonite zone is observable in the Rabaçal section, and the basal part of Jamesoni Zone is probably missing. The green dots indicate the Pliensbachian/Toarcian boundary (182.7 Ma). The top of the *Spinatum* Zone is eroded in the São Pedro de Moel section. No TOC measurements are available for certain parts of the column, which does not necessarily mean that TOC is equal to zero in these intervals.

in a 10-m-thick interval. Laterally, these values decrease to 4 wt % in the proximal part of the basin at Coimbra and Rabaçal. All these data are well documented (e.g. Duarte *et al.*, 2010) and are presented here in Fig. 7.

The fraction of terrestrial organic matter records a similar impact on the measured signal throughout the basin. This observation is supported by palynofacies analyses, which indicate that organic material is dominated by amorphous organic matter (>60%) with a significant proportion of phytoclasts (5–19%) and palynomorphs (3–18%) (Ferreira *et al.*, 2010a,b; Duarte *et al.*, 2012; Silva *et al.*, 2012; Ribeiro *et al.*, 2013). The proportion of amorphous organic matter in TOC varies from 60 to 80%. The lowest proportions of amorphous organic matter are associated with high TOC pulses corresponding to a higher input of terrestrial organic matter. Even if these variations are not negligible, it is still appropriate to compare the measured TOC with simulated TOC. Simulated TOC appears to be 20% (for the mean signal) to 40% (for the high pulses) lower than the measured TOC. Even if this study focuses on variations rather than precise TOC values, this latter aspect must be borne in mind.

The quantity of TOC loss due to hydrocarbon generation and expulsion is considered negligible throughout the basin. This assumption is justified by the Tmax value of around 425–430 °C reported in numerous studies (e.g. Baudin *et al.*, 1990; Ferreira *et al.*, 2010a,b; Duarte *et al.*, 2012; Silva *et al.*, 2012), which indicates a limited effect of thermal alteration on the organic matter. This leads us to consider that the marine fraction of the measured signal

represents the initial TOC value, because of the low maturity values recorded in the Northern Lusitanian Basin.

Variations in the organic content do not give rise to any real difference in mineralogy between similar lithostratigraphic formations. Figure 8 presents mineralogical analyses by X-ray diffraction, coupled with Rock-Eval pyrolysis performed on 18 samples from the Peniche Margaritatus Zone. This set of samples spans a 2-m-thick interval of marls with some cm-thick marly-limestone beds and one thin black shale layer. Variations in the relative abundances of each mineralogical fraction are less than 15%. The major difference in mineralogy is observed between limestone and marls. The black shale layer (sample 9) reaches 7.5 wt % TOC, but its mineralogical content is similar to the other marly samples. Detailed analytical data are available in Table 1.

3D FORWARD STRATIGRAPHIC MODELLING

Modelling strategy

In this study, our goal was to explore how regional tectonics, relative sea-level changes, primary production, environmental conditions, sedimentation and morphology can influence organic matter distribution and heterogeneity, and to identify and quantify the key processes. To achieve this, we created a classical 3D forward stratigraphic model reproducing the evolution and facies distribution of the Northern Lusitanian basin. The model is calibrated by

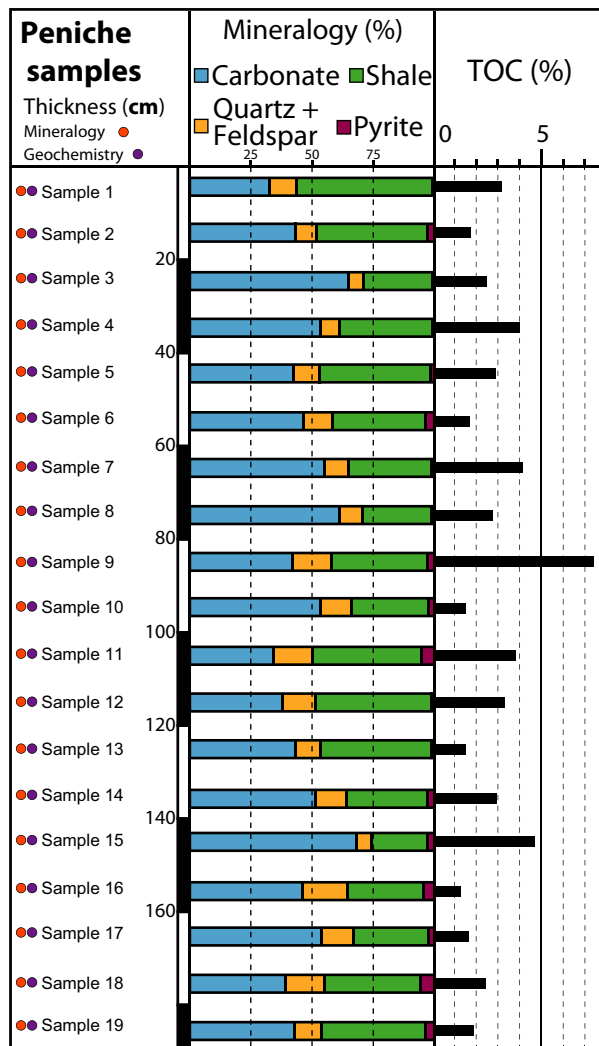


Fig. 8. Bulk mineralogical and TOC variations over a short interval (Margaritatus Zone) of the Peniche section. In this facies, there is no clear correlation between mineralogy and TOC content. Detailed pyrolysis results are reported in Table 1.

trial and error using observed facies distribution and thicknesses. The settings used for the best-fit model are reported below. Based on this best-fit model, we perform organic matter modelling with DionisoFlow© Organic-Rich Sediments. In the following sections, we present and discuss the results of four models testing different organic matter inputs.

Basin morphology construction

The computed model covers an area of 150*150 km (Fig. 1) with square cells measuring 5 km on a side. The modelling starts at 193.8 Ma (top Obtusum Zone) and ends at 178.2 Ma (top Bifrons Zone) with a time step of 100 kyr (Fig. 5). The initial horizon dated at 193.8 Ma (Obtusum Zone) is taken as the first stratigraphic marker, and five additional horizons are used to constrain the basin modelling: 190.8 Ma (top Raricostatum Zone),

Table 1. Rock-Eval pyrolysis results for samples from the Pliensbachian Margaritatus Zone of Peniche. The total organic carbon is made up of a mixture of marine organic matter (60–80%) and terrestrial organic matter (20–40%), leading to lower HI values than in organic matter of fully marine origin

Sample	Tmax (°C)	TOC (wt %)	HI (mg HC g ⁻¹)	OI (mg CO ₂ g ⁻¹)
1	433	3.33	158	84
2	429	1.84	178	58
3	431	2.59	225	41
4	429	4.14	379	24
5	429	3.01	231	39
6	433	1.79	151	44
7	424	4.21	348	28
8	430	2.86	252	73
9	425	7.52	457	42
10	423	1.58	49	189
11	424	3.88	355	35
12	428	3.39	272	69
13	432	1.61	106	134
14	434	2.91	213	104
15	428	4.81	290	60
16	423	1.35	42	173
17	429	1.72	58	141
18	434	2.52	201	111
19	435	1.98	111	130

HI, hydrogen index; OI, oxygen index.

187.6 Ma (top Davoei-Margaritatus Zone), 182.7 Ma (top Spinatum Zone), 180.4 Ma (top Levisoni Zone), and 178.2 Ma (top Bifrons Zone). Bathymetric and thickness maps of these horizons are then used to compute the accommodation space, yielding estimates of sediment production and a general reconstruction of the geometry of the study area. Six bathymetric maps (Fig. 9) are created and extrapolated from palaeo-environmental maps and the estimated water depths of each specific facies association (Duarte, 1997; Duarte *et al.*, 2010; Thierry, 2010; Thierry & Barrier, 2010; Silva *et al.*, 2015). Five thickness maps (Fig. 10) are created and extrapolated from outcrop sections. By applying a backstripping methodology with bathymetric and thickness maps, these data allow us to calculate the time-evolution of accommodation space in the basin. Sediment production and diffusional transport are calculated in a subsequent treatment step.

Sediment production and diffusional transport

The simulated sediment types used in the DionisoFlow© models are defined as a function of production and diffusional transport processes. Four sediment classes are used for this study. (1) *Fine carbonate*: associated with carbonate deposits of very-low-energy environments, corresponding to mud-supported carbonate with mudstone textures. This sediment type can be found in the basin depocentres; (2) *Bioclastic carbonate*: mainly associated

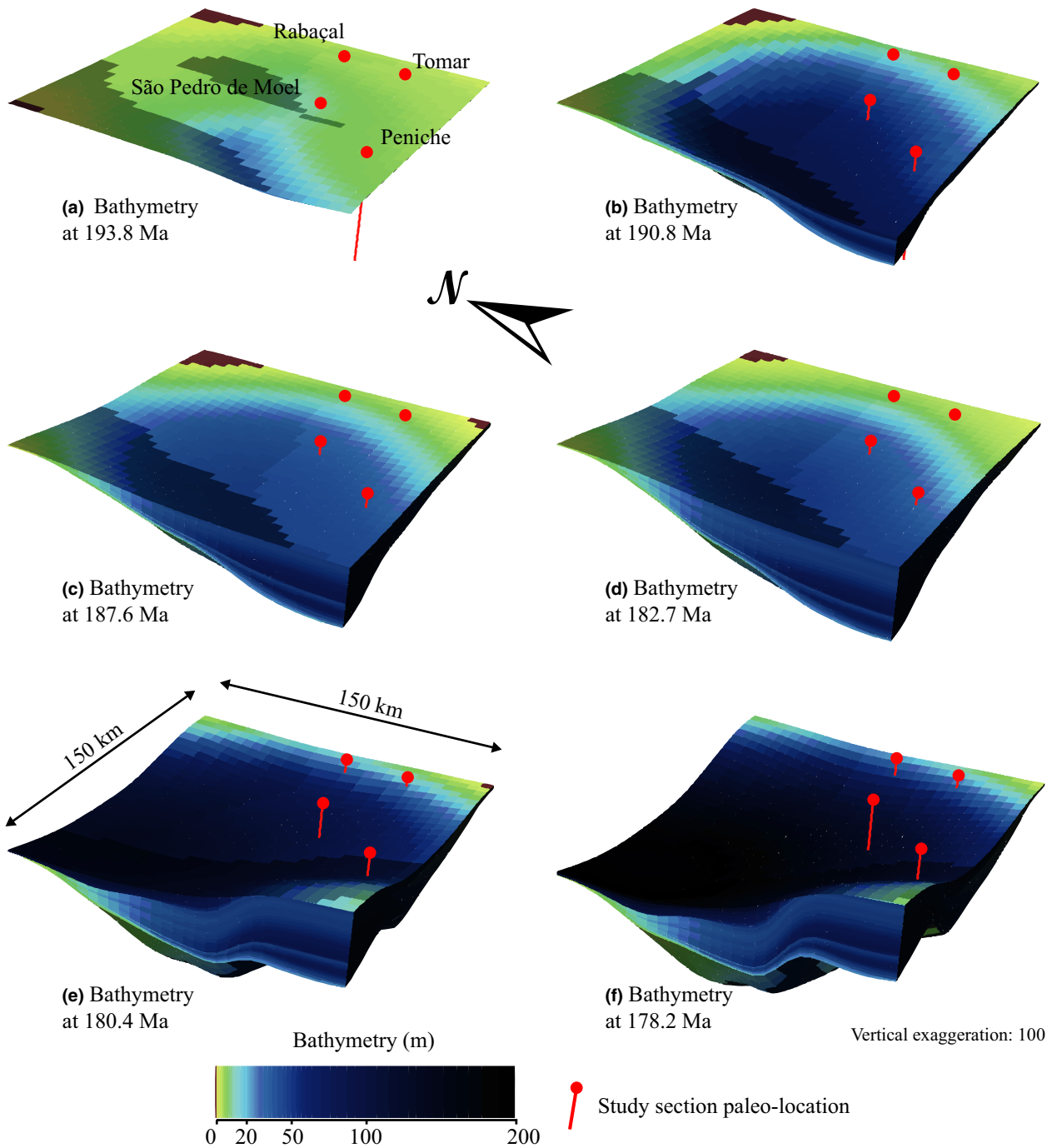


Fig. 9. Evolution of palaeo-bathymetry of Northern Lusitanian Basin from the Sinemurian to the Toarcian (scale in metres). a. 193.8 Ma (Obtusum Zone); b. 190.8 Ma (top Raricostatum Zone); c. 187.6 Ma (top Davoei Zone); d. 182.7 Ma (top Spinatum Zone); e. 180.4 Ma (top Levisoni Zone); f. 178.2 Ma (top Bifrons Zone). The palaeo-bathymetric maps are first constructed based on published analyses of depositional environments (Duarte, 1997; Duarte *et al.*, 2010; Thierry, 2010; Thierry & Barrier, 2010) and later modified by trial and error to match the observed sections.

with carbonate deposits, and also containing bioclastic material, corresponding to mud-supported carbonates with wackestone to packstone textures. It can be found among all the ramp facies but mainly in the Ramp Slope domain; (3) *Shallow carbonate/dolostone*: mainly associated with dolomite, and also containing oolitic and bioclastic material, as well as bivalves and other constituents characteristic of high-energy environments,

corresponding to grain-supported carbonates with packstone to grainstone textures mainly found in the inner ramp domain; (4) *Shale*: associated with the fine clastic component of sediments, related to the low-energy conditions in basin depocentres.

These sediments display different transport behaviours according to the coupling of slow linear slope creep (diffusional transport) with the fast nonlinear transport

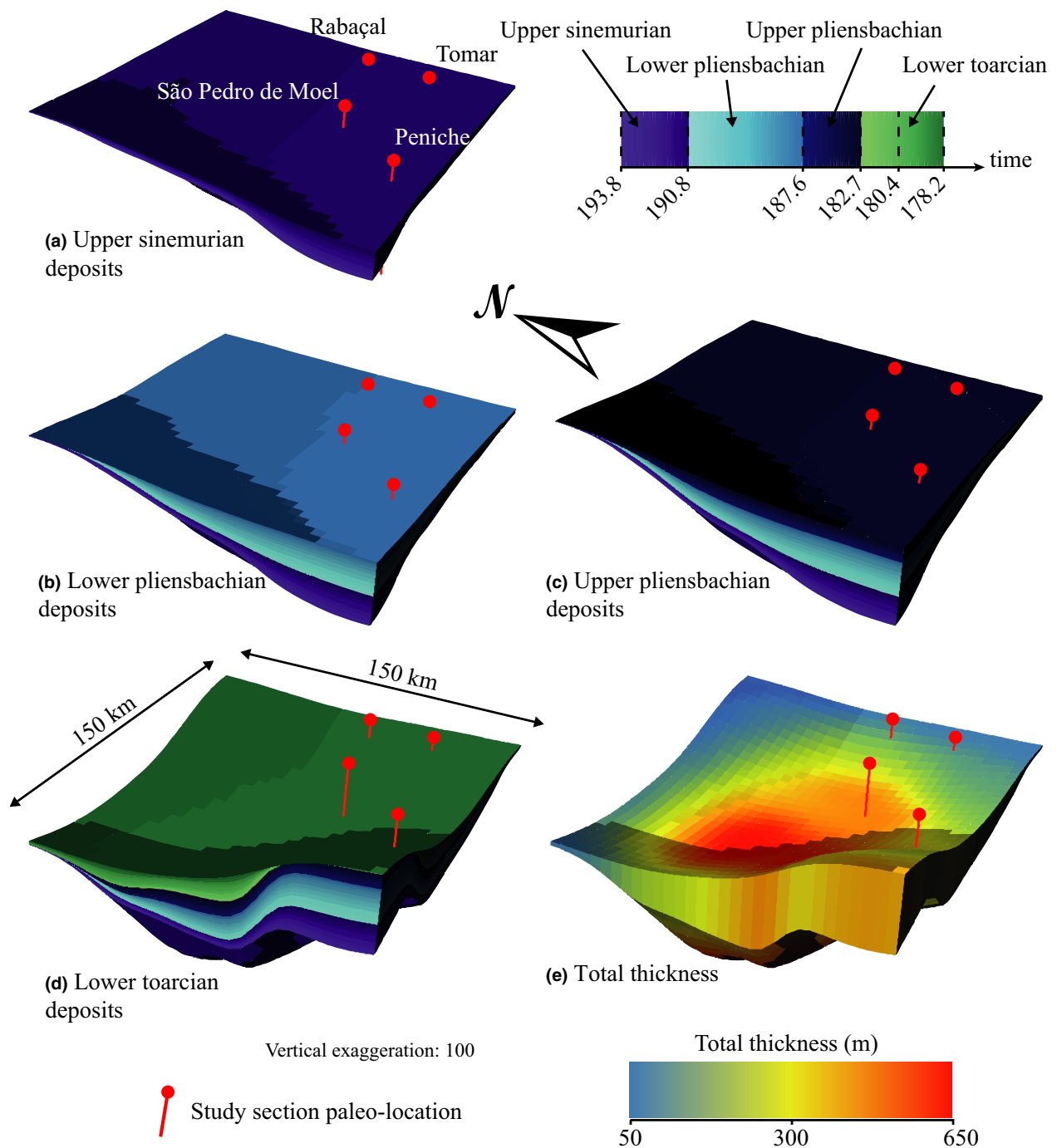


Fig. 10. Thicknesses of deposits belonging to the different stages in the Northern Lusitanian Basin. a. Upper Sinemurian (Oxynotum to top Raricostatum Zone); b. Lower Pliembachian (top Raricostatum to top Davoei Zone); c. Upper Pliembachian (top Davoei to top Spinatum Zone); d. Lower Toarcian (top Spinatum to top Bifrons Zone); e. Total thickness from 193.8 to 178.2 Ma. The thickness maps are constructed from analyses and extrapolation of the studied sections.

associated with fluvial processes, which allow us to simulate sediment movement at the kilometre scale and over long time spans (e.g. Rabineau *et al.*, 2005; Alzaga-Ruiz *et al.*, 2009). The sediment is assumed to be made up of a given number of grain-size fractions. The mass conservation equation is applied to each grain-size fraction. All processes leading to the movement of sediment are pooled together into two large-scale processes: slow slope creep and fast fluvial transport. In our study, fluvial transport is

not taken into account because the clastic sources are unknown. The slow creeping of sediment is assumed to be proportional to the local slope of the landscape, leading to linear sediment transport (Culling, 1960). This linearity is valid only for gentle slopes and several studies have demonstrated that nonlinear processes take place when the slopes are steeper than 25° (e.g. Roering *et al.*, 1999). In our study, it is assumed that such steep slopes never develop in the simulated area, and that slope creep can

therefore be simulated using a simple linear diffusional transport equation (Granjeon, 1996). Diffusion coefficients are discriminated according to grain size. Clay-grade particles are more easily transported than silt because sediment suspension is better developed.

Facies and thickness calibration

In this step, trial and error simulations are used to modify and tune the initial parameters in order to reproduce the thicknesses and facies observed in the field (Fig. 7). Facies are defined for each cell of the model according to the bathymetry and percentage abundance of each simulated sediment type, and the simulated facies are compared against the observed facies. Figure 11 presents the final sediment production history (as a function of time and water depth) used for the model calibration. The average discrepancy between simulated and real sediment thickness is around 5% (around 10 m for the total sediment column simulated here). Both vertical and lateral (simulated) facies variations match with the interpretation of data from field studies and the literature. Only a small number of cells show differences due to difficulties in reproducing the lateral facies changes with satisfactory precision. In such cases, cells with appropriate facies can be found within a maximum radius of two cells (10 km) from the calibration point. Comparisons between the model and field sections are given in Fig. 12.

ORGANIC MATTER FORWARD MODELLING RESULTS

Four models with different parameters are developed: (1) constant primary production and a simple variation of dissolved oxygen level (the “Reference Model”), (2) primary production variation scaled by distance to the shoreline (the “Primary Production Variation Model”), (3) irregular primary production variation scaled by a single TOC pulse (the “Primary Production Pulse Model”), (4) irregular dissolved oxygen level scaled by the TOC pulses (the “Oxygen Depletion Pulse Model”). The results of these four models include the simulated initial TOC related to the distribution of marine organic matter after the first few metres of burial. As explained above, this simulated TOC represents an average organic content and does not closely reproduce every high TOC pulse (see discussion chapter).

Reference model 1

In this control Reference Model 1, the primary productivity is set as constant ($200 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$) with time, whatever its position in the model. No external oxygen variation is imposed through time; as previously explained, the oxygen concentration decreases in the water column due to coupling between primary

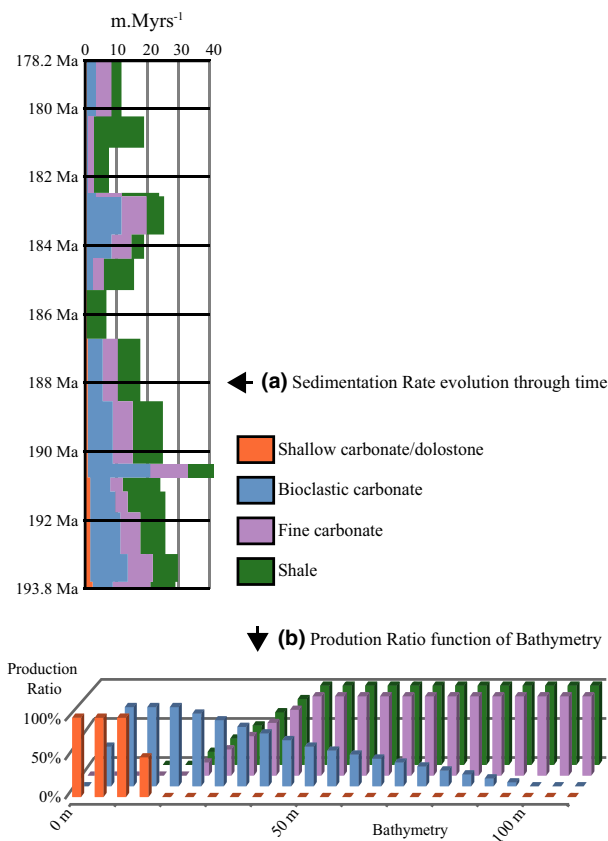


Fig. 11. Final sediment production history as a function of time and water depth used for the model calibration. (a) Sediment production history applied in the model. These production rates correspond to the thickness in metres of lithified sediment produced per million years in a given cell as function of time. The production rate is multiplied by the production ratio, depending on the lithology and calculated according to the water depth, to determine the final production within each cell. (b) Production ratio (%) depending on the water depth for each sedimentary facies. Fine carbonate and shale is produced at water depths >20 m below the fair-weather wave base and reaches maximum productivity below 50 m. Bioclastic carbonate is produced mainly in the photic zone between 10 and 50 m, where the energy is not too high, and then decreases in abundance down to the base of the photic zone. Shallow carbonates and dolostones are produced from 0 to 10 m water depth where sub-aerial emergence is possible and the energy is potentially higher.

productivity, water depth and oxygen consumption. The triggering of the organic matter response depends entirely on the sedimentation rates and bathymetric variations used in this simulation.

Three main TOC-rich horizons are visible in this case (Figs 12, 13 and 14). The first corresponds to the Oxynotum Zone (Upper Sinemurian, source rock 1), the second to the Davoei-Margaritatus Zones (Lower–Upper Pliensbachian, source rock 2) and the third to the Polymorphum-Levisoni Zones (Lower Toarcian, source rock 3). These three source rock formations extend over different areas and also show different thicknesses. Source rock 1 is restricted to the São Pedro de Moel area and reaches a

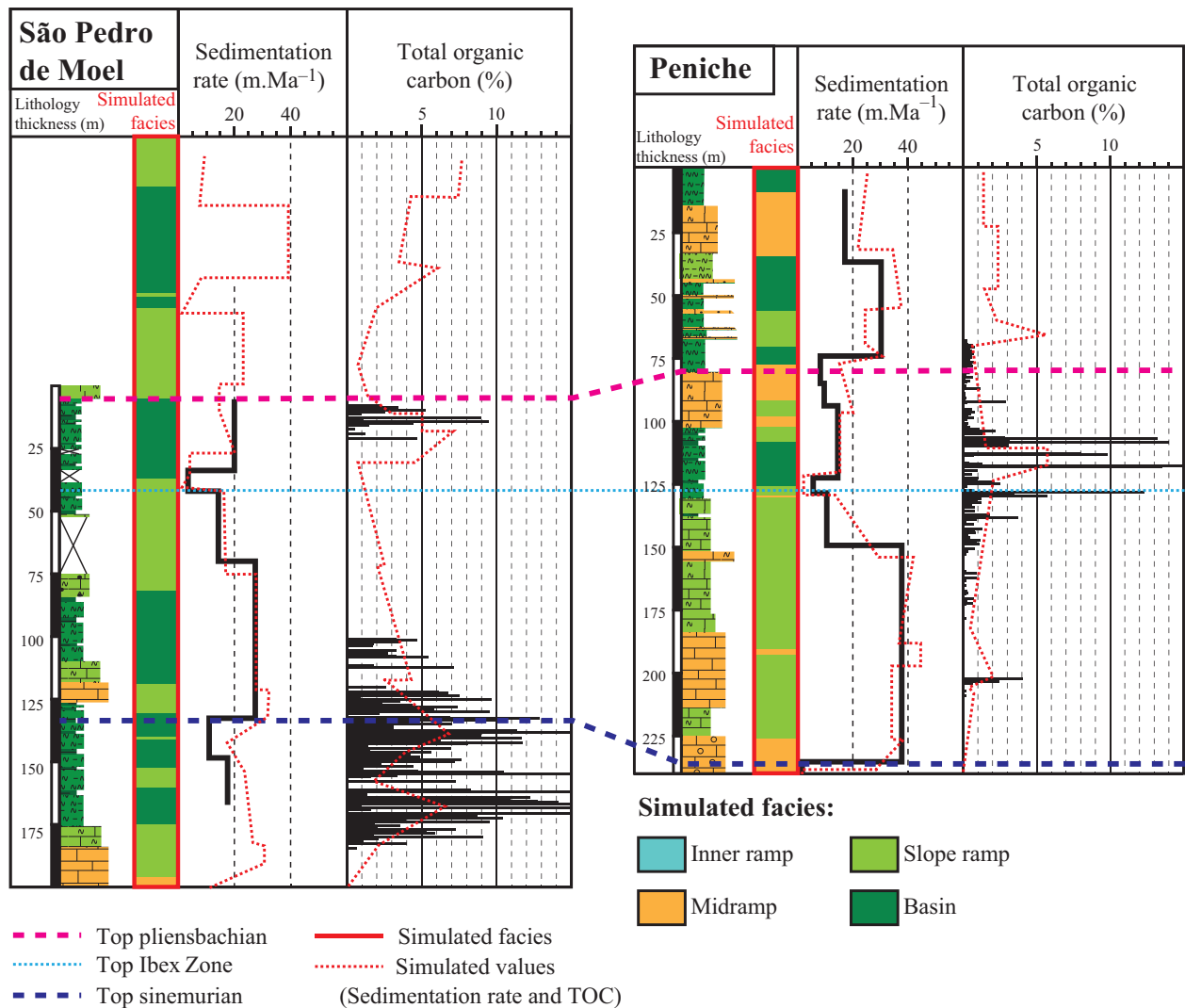


Fig. 12. Comparison of lithology, sedimentation rate and TOC between measured and simulated values for the Peniche and São Pedro de Moel sections. The solid black lines indicate the evolution of sedimentation rates calculated from thickness + duration of ammonite zones and the measured TOC. The red dotted lines indicate the simulated values. The purple, pink and blue dotted lines indicate the top of the Sinemurian, the top of Ibex Zone and the top of the Pliensbachian, respectively. An offset of a few metres, linked to the difficulty of fitting both facies and thickness, is sometimes observable between the real and the simulated sections. According to the simulation, the Toarcian appears to exhibit environmental conditions suitable for the deposition of an organic-rich interval, contrary to field observations.

thickness of 50 m. Only a thin layer of this source rock extends to Peniche. The TOC contents rise to 8–10 wt % in the deepest part of the basin, which corresponds to shaly deposits. In the proximal part of the basin, which corresponds to marl-limestone alternations and bioclastic limestones, the TOC values fall to between 0 and 3 wt %. The highest TOC values are observed in cells with sedimentation rates higher than 20 m Ma⁻¹. High TOC contents appear to be also related to water depths >50 m where there is a low oxygen level at the seafloor (Ramp Slope and Basin facies). Source rock 2 shows large variations in thickness (from 10 to more than 60 m) and extends over a wider area than source rock 1 (from São Pedro de Moel to Peniche). The TOC contents reach up to 8 wt %. Some horizons are particularly organic-rich in

the most proximal parts of the basin associated with shallow water depth (see Pliensbachian in Figs 12, 13 and 14). These modelled enrichments (up to 3 wt %) are not supported by the field data, and this aspect is discussed further below.

When the Berlenga horst was uplifted, the environmental conditions suitable for source rocks 1 and 2 migrated towards the North (around 50 km), and this also resulted in an extension of source rock 3 in the same direction. In the case of source rocks 1 and 2, the Ramp Slope and Basin facies correspond to the highest TOC values. The thickness of this source rock also shows large variations (5–50 m) and TOC reaches up to 10 wt %.

For the whole model, the average simulated TOC values are higher (1–2 wt %) than those measured from field

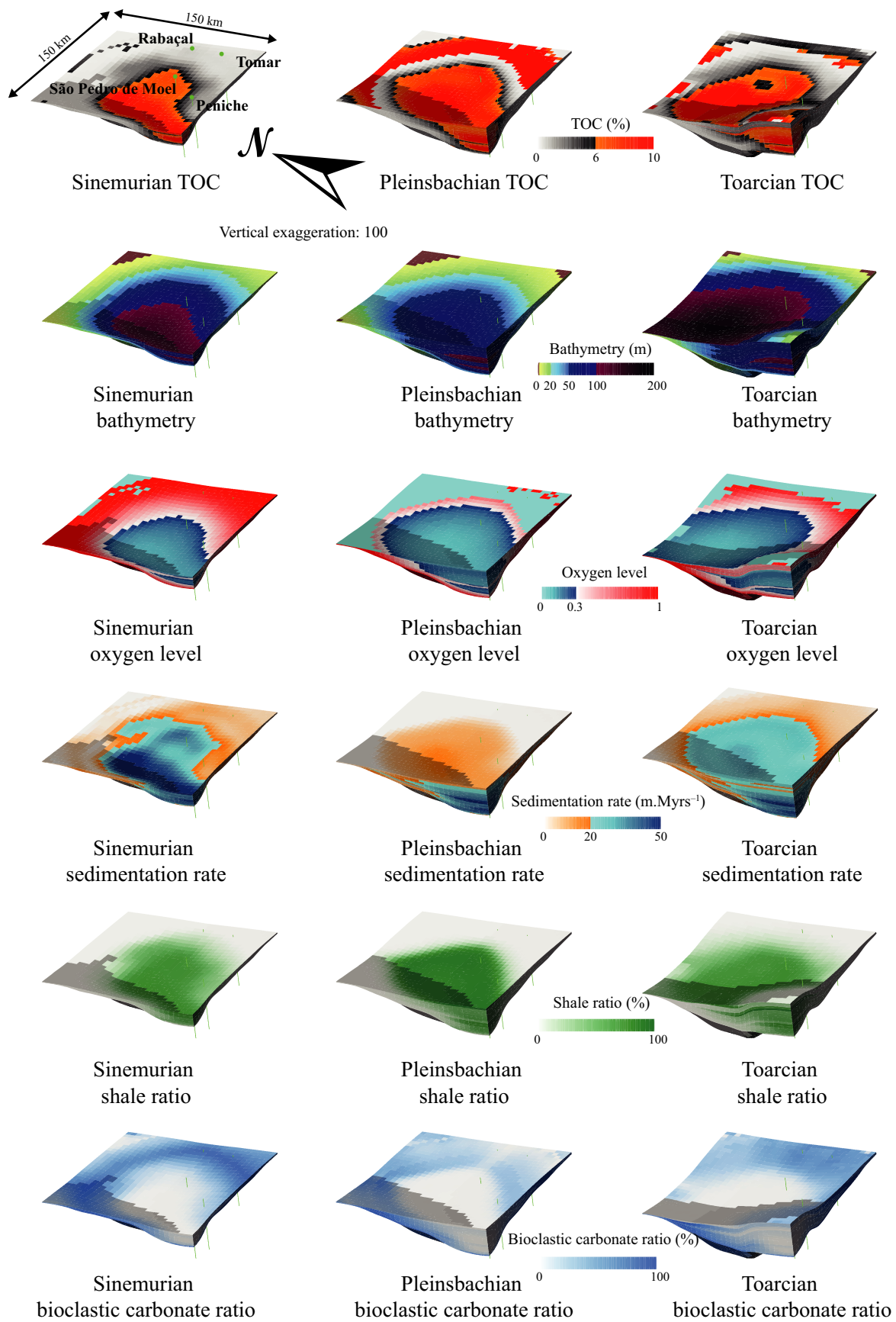


Fig. 13. Results of the Reference Model. Each column show outputs of the simulation for the three organic-rich intervals: Sinemurian (Oxynotum Zone), Pleinsbachian (Davoei Zone) and Toarcian (Polymorphum Zone). High TOC contents seem to be linked to the deepest bathymetry, associated with higher sedimentation rates and shale ratio, whereas the oxygen level is low.

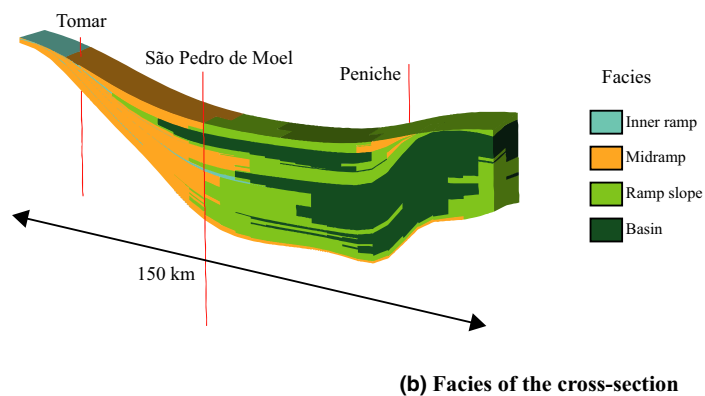
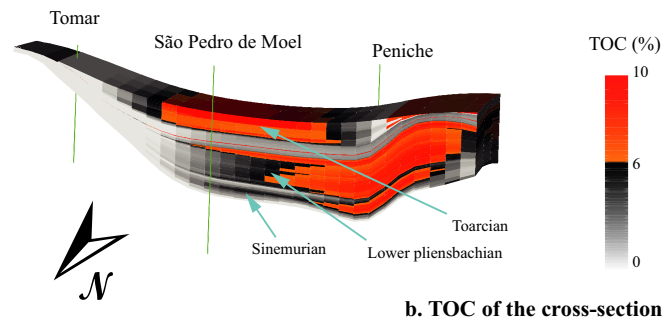
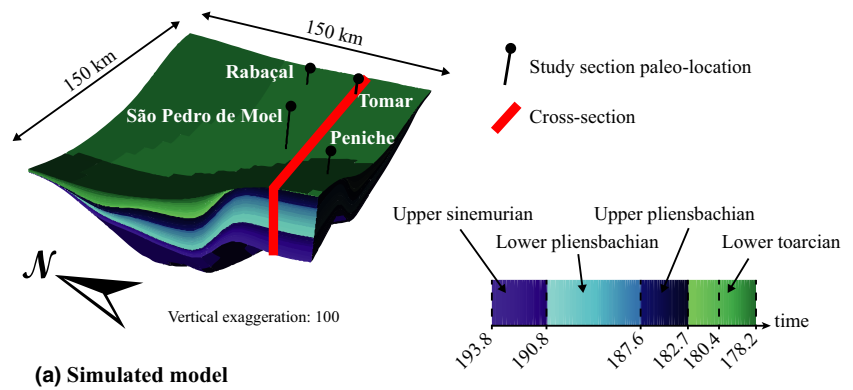


Fig. 14. Cross-section of the simulated model in structural position at the end of the Lower Toarcian. a. location of the cross-section. b. TOC content distribution in section c. facies distribution in the same section. The deepest part of the basin is located towards the north-west near the São Pedro de Moel section. Three organic-rich horizons are observable: Upper Sinemurian (Oxynotum Zone), Upper Pliembachian (Davoei Zone) and Lower Toarcian (Polymorphum Zone). High TOC contents correspond to Ramp Slope/Basin facies dominated by marls and shales.

samples if we exclude the high TOC pulses (>10 wt %). Although the simulated TOC values are more homogeneous than in the real case study, they show the same relative variations, except for the Lower Toarcian which is discussed in the next section. Source rocks are associated with Ramp Slope and Basin facies where water depth is >50 m and oxygen levels are low. The areal extent of the source rocks is controlled by the migration of suitable environmental conditions.

Primary productivity variation model 2

In the Primary Productivity Variation Model 2, primary productivity is the only parameter modified relative to model 1. A lower primary productivity is defined, $150 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$, and a seaward stepwise decrease of $20 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$ is imposed every 10 km. Here, the response of the organic matter varies not only according to the sedimentation rate and bathymetry but also with

distance from the coastline (Fig. 15). As expected in this setting, TOC values are significantly lower than in Reference Model 1. The simulated continuous background signal (near 0 wt %) is fully representative of the Northern Lusitanian Basin. In comparison with the reference case study, we note that the three source rocks are still present. In this setting, TOC only reaches a maximum value of 1 wt % in the simulated sections and 2.5 wt % in the deepest part of the basin (Fig. 15). The source rocks are concentrated in the deepest part of the basin and are less extensive than in Reference Model 1. As in the previous model, some organic-rich deposits occur in the more proximal part of the basin (see discussion) (Fig. 15).

Primary productivity pulse model 3

In the Primary Productivity Pulse Model 3, primary productivity is modified relative to the Reference Model 1. While the primary productivity is set at

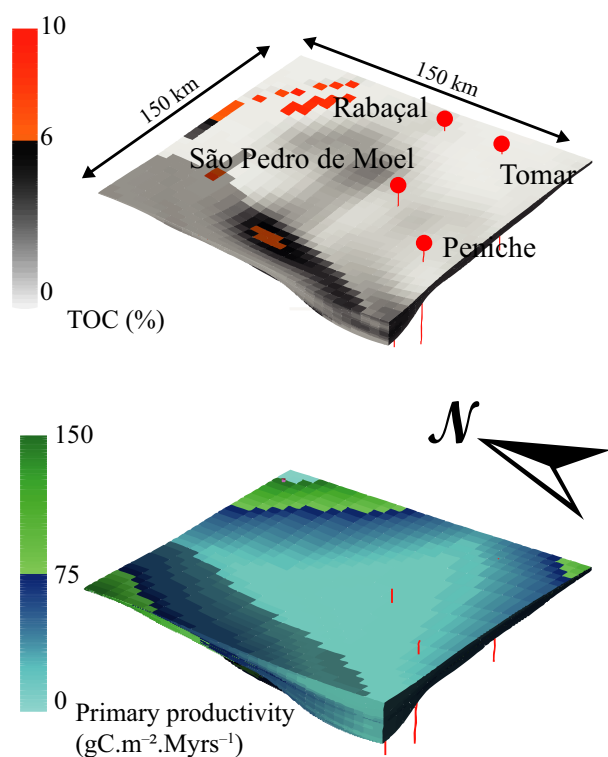


Fig. 15. Results of the Primary Productivity Variation Model. The primary productivity is defined as $150 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$, and a seaward stepwise decrease of $20 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$ is imposed every 10 km. From Sinemurian to Upper Pliensbachian times, the coastlines are located to the North and East of the basin. During the Toarcian, uplift of the Berlenga horst in the south-western part of the basin leads to inputs from a new siliciclastic source, whereas the northern part is opened to the Celtic Sea, interrupting sediment supply from the southern source area.

$200 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$, a pulse in primary productivity is introduced during the Davoei-Margaritatus Zones (Lower–Upper Pliensbachian) to simulate the recorded TOC pulse in the Northern Lusitanian Basin. This pulse is simulated over one time step (100 kyr) and reaches a primary productivity peak of $600 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$. The pulse is defined explicitly for a period when the seafloor oxygen level is high in Reference Model 1. The simulated TOC of this specific time step is closely similar to model 1 in the proximal part of the basin, whereas the distal part shows values of up to 25 wt % (as against 6 wt % in model 1) (Fig. 16). Sedimentation rate is also increased (around 5 m Ma^{-1}) over this time step because of the accumulation of organic matter. The oxygen level is sharply reduced at water depths shallower than 20 m in model 3 due to the increase in primary productivity (Fig. 16).

Oxygen depletion pulse model 4

In the Oxygen Depletion Pulse Model 4, only the oxygen level is modified relative to Reference Model 1. The primary productivity is set at $200 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$. An

oxygen depletion is introduced during the Margaritatus-Davoei Zones (Upper Pliensbachian) as an alternative, to simulate the measured TOC pulse recorded at this time. This pulse is simulated over one time step (100 kyr) and the oxygen level ratio at the sea surface is set at 0.2 with respect to the reference oxygen level. This depletion leads to anoxic conditions (oxygen content around 0) at the sediment–water interface where water depths are $>20 \text{ m}$. The associated TOC values are higher than in Reference Model 1 (around 13 wt % as against 6 wt % in the model 1) for this time step.

DISCUSSION

It is a complicated task to distinguish between primary productivity and factors favouring the preservation of organic matter in the sedimentary record, even if numerous studies have focused on this topic (e.g. Martin *et al.*, 1987; Betts & Holland, 1991; Wignall, 1994; Baudin, 1995; Tyson, 1995; Mann & Zweigel, 2008; Zonneveld *et al.*, 2010). Because of the integrated and large-scale quantitative approach made possible by numerical modelling, we can now distinguish key factors leading to the formation of organic-rich deposits and their heterogeneities in sedimentary basins.

Organic-rich horizons

Our modelling approach involves the simulation and calibration of multiple coupled processes, providing information on the distribution and heterogeneity of organic matter, in contrast to stochastic models which only yield variations based on extrapolations. This heterogeneity in TOC and mineralogy between calibration points is linked to the different feedbacks between the various processes involved. The parameters of Reference Model 1 allow the simulation of moderately TOC-rich horizons (more than 6 wt %) with constant primary productivity ($200 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$) and oxygen levels linked only to bathymetry. In the following, we discuss the three main organic-rich horizons, which are the Oxynotum Zone (Upper Sinemurian), Davoei-Margaritatus Zone (Lower–Upper Pliensbachian) and Polymorphum-Levisioni Zone (Lower Toarcian), the latter being only recorded offshore. In fact, these horizons are mainly related to sedimentation rates that must remain in the range between 20 and 40 m Ma^{-1} to allow source rock development. In our model, these conditions are promoted in the distal part of the basin by shaly facies and water depths $>50 \text{ m}$. In this relatively deep environment (below fair-weather wave base), the organic matter is well preserved, mostly because of the low oxygen levels and weak hydrodynamics. The moderate sedimentation rate leads to a fairly rich TOC signal because of the low dilution of organic matter. The bathymetry and sedimentation rate play a key role in the deposition and preservation of organic-rich sediments. Furthermore, in the Primary Productivity Variation

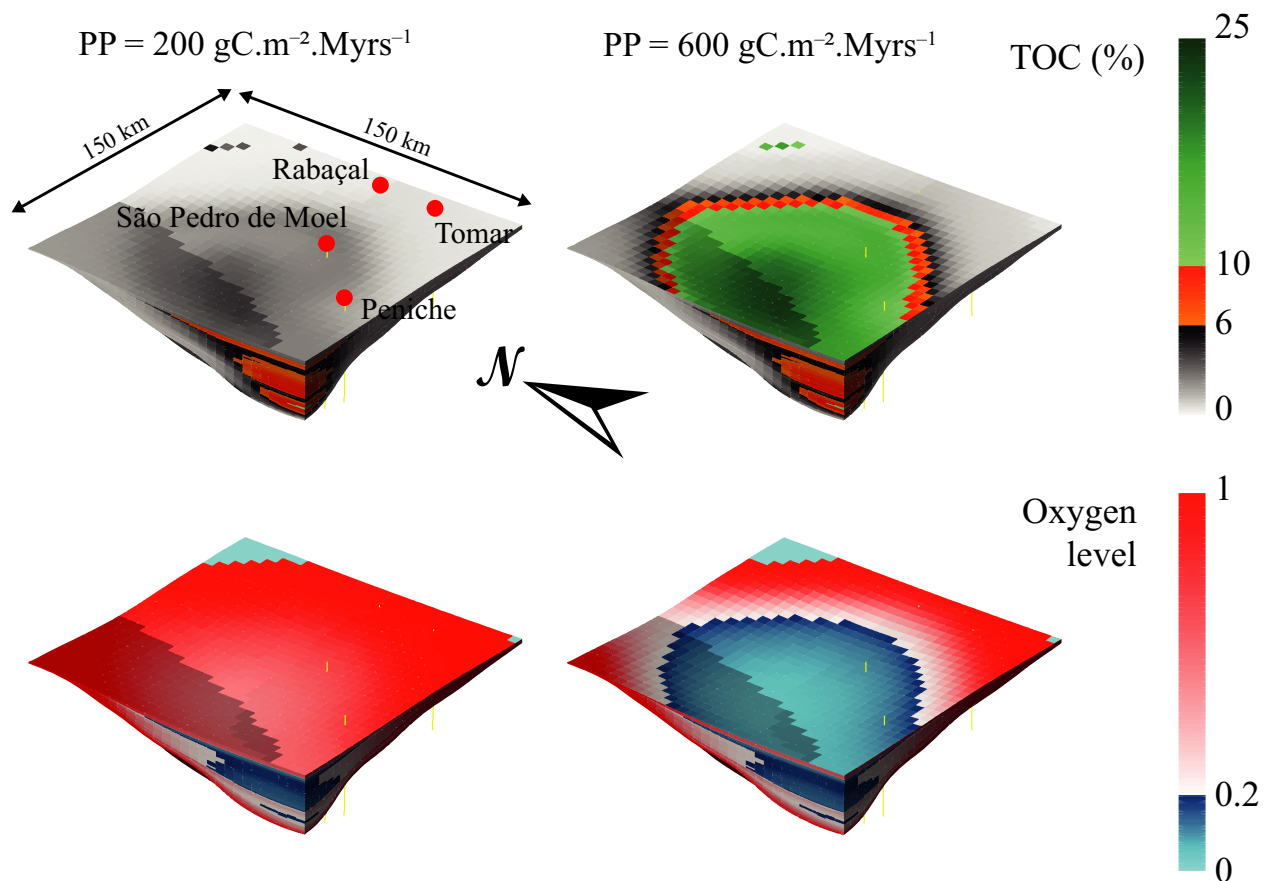


Fig. 16. Results of the Primary Productivity Pulse Model. The primary productivity pulse is reproduced during the Davoei-Margari-tatus Zone (Lower–Upper Pliensbachian), with its duration spread over 1 time step (100 kyr), reaching a primary productivity of $600 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$. The TOC increases and the oxygen level is sharply reduced.

Model 2, organic-rich horizons are reproduced using a lower primary productivity ($150 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$) and a seaward stepwise decrease ($20 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$ every 10 km). In this case, the primary productivity is much lower in the distal part ($60\text{--}25 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$), but the sedimentation rate and oxygen level still allow us to simulate organic-rich horizons (up to 7 wt %; note that the relation between primary productivity and TOC is not linear because other processes can also impact TOC). The distribution of TOC is also closer to the TOC measured in the field than in the case with no seaward decrease of primary productivity. In our model, the key factors promoting organic-rich horizons are the morphology of the basin controlled by sediment supply, as well as bathymetry and distance to the shoreline, even with a relatively low primary production input. However, the seaward decrease of primary productivity might not be significant in this particular case because of the small size of the Lusitanian Basin.

HighTOC pulses

Very high organic content pulses (>to 10 wt %) cannot be reproduced solely by variations in sedimentation rates or bathymetry (Fig. 12). An enhancement of primary

productivity and/or oxygen depletion is required to simulate the TOC pulse observed in the field. Primary Productivity Pulse Model 3 and Oxygen Depletion Pulse Model 4 lead to TOC pulses of 25 and 13 wt %, respectively. In both cases, anoxic conditions are attained (i.e. oxygen levels five times less than the initial value) as supported by the data (e.g. Duarte *et al.*, 2010; Suan *et al.*, 2010; Silva & Duarte, 2015). Precise quantification of the relative efficiency of primary productivity and oxygen depletion is still a problem and requires further investigation. Moreover, these models are simulated over a time step of 100 kyr. It is difficult to obtain a more accurate chronostratigraphic control than that provided by ammonite zonation. The duration of a TOC pulse is currently almost impossible to determine. The time scale to be used when comparing simulated TOC (with a 100 kyr time step) with measured TOC remains an open question.

Bioturbation

In comparing the results of these models with case studies, the main differences arise from the minimum TOC value simulated for Peniche and São Pedro de Moel (Figs 12 and 13). The simulated values are around 3 wt % as against 0 wt % in the real case study. This

discrepancy is observed in proximal facies with water depths less than 50 m, but does not systematically appear in the most proximal inner ramp facies composed of *Dolostone and shallow limestone*. However, the proximal mid-ramp facies (mainly composed of *Bioclastic and fossiliferous limestone*) always show a difference between the measurements and the simulation results, which is probably linked to the empirical equations used in our models. Most of the statistical data used to develop these equations are based on observations of sediment traps below 50 m water depth (e.g. Martin *et al.*, 1987). This clearly results in an underestimation of phenomena occurring in waters shallower than 50 m. In this case, the facies involved is associated with more than 40–50% of *Bioclastic carbonate* component. Therefore, in these deposits, the difference between measurements and modelling results can probably be attributed to bioturbation and intense sediment reworking by local fauna. Some studies suggest that a short exposure of buried sediment to oxygenated water can obliterate all the organic matter (e.g. Wignall, 1994). This bioturbation and reworking are not yet taken into account in current models.

Organic matter transport

Even if higher simulated TOC values can be obtained with increase of primary productivity or decrease in dissolved oxygen levels (Models 3 and 4), the global distribution of organic matter is mainly related to sedimentation rates (between 20 and 40 m Myr⁻¹) and water depth >50 m (Models 1 and 2). It corresponds to environments promoting organic matter preservation. The extension of the source rocks follows the migration of these environments promoted in the distal part of the basin by shaly facies. Because gravity-driven transport of organic matter across the ramp is similar to silt transport in our model and because of the small size of the modelled basin, the distribution of organic matter and clay particles occurs in the same area (depocentre). In both cases, organic matter transport delivery locations and organic matter suitable conservation environments, the morphology of the basin is a major factor for organic matter distribution. Further investigations are needed to accurately determine the transport behaviour of organic matter and its impact on organic matter distribution.

Early Toarcian

For the Polymorphum–Levisoni Zones (early Toarcian), the simulations lead to a moderately organic-rich horizon which is not supported by the data of the Peniche section. As the Toarcian is missing from the São Pedro de Moel distal section, no data are available for comparison. One solution to reproduce the low TOC content observed in the real case study would be to set the primary productivity close to 0 gC m⁻² year⁻¹. This approach appears inappropriate at a global scale, as the Toarcian is described as a moderately to highly productive interval

(e.g. Jenkyns, 1988; Farrimond *et al.*, 1989; Baudin *et al.*, 1990; Baudin, 1995; Bodin *et al.*, 2011). However, the high organic matter content associated with the early Toarcian Oceanic Anoxic Event led to a better preservation of organic matter and the formation of potential source rocks (e.g. Jenkyns, 1988), so fixing the primary productivity at ~0 should be ruled out. The only notable exception where European Lower Toarcian organic carbon contents are low occurs in fine to medium siliciclastic deposits (cf. fine silty sands of the Bridport Sand Formation in Dorset, UK), but this example is not comparable with the facies in the Lusitanian Basin. As discussed above, we could evoke the impact of bioturbation in shallow-water facies, but this does not explain why the simulated TOC values are too high in the deepest environments where bioturbation is less well developed. This difference can be linked to the transport and deposition of organic matter in deeper parts of the basin where data are not available (a great part of the Toarcian is eroded from the São Pedro de Moel section). In our simulation, the gravity-driven transport of organic matter across the ramp is similar to silt transport. More complex transport laws might be considered. Another hypothesis accounting for the low TOC content could be an increase in dissolved oxygen levels during this interval favouring organic matter degradation. This increase or enhanced renewal of dissolved oxygen in the studied area can be explained by: (1) the evolution of a sill and opening of communication between the Lusitanian Basin and the Celtic Sea during the Early Toarcian that would contribute to the creation of oceanic circulation favouring oxygenation or (2) the transport of oxygen towards the deepest parts of the basin via turbidites, which are well recorded in the Lower Toarcian deposits of Peniche (e.g. Wright & Wilson, 1984; Duarte, 2007).

CONCLUSIONS

This study aims to analyse the processes controlling organic matter distribution and heterogeneity through a numerical quantitative approach applied to the Lower Jurassic succession of the Northern Lusitanian Basin. A 3D numerical model is built with the software DionisosFlow© Organic-Rich Sediment and four different parameters are used to simulate the evolution of marine organic matter in the basin. A high primary productivity as well as factors favouring organic matter preservation could theoretically create conditions for the development of high organic carbon contents in sediments. The modelling results and associated interpretations allow us to draw several important conclusions:

- (1) The source rocks are located in an area where sedimentation rates are higher than 20 m Ma⁻¹, with water depths >50 m and low dissolved oxygen levels at the sediment/water interface. These suitable environmental conditions are developed in the Ramp Slope and Basin facies. The extension of the source

rocks in time and space is directly connected to the migration of these conditions.

- (2) Organic-rich intervals (6–10 wt %) recorded in the Sinemurian and Pliensbachian can be simulated by fixing a constant primary productivity in time and space ($200 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$) and oxygen variations linked to bathymetry. In this case, only the bathymetry and sedimentation rates are involved in controlling the variation of TOC content and the appearance of organic-rich intervals. However, this model produces a “homogenous” average TOC signal made up of organic-rich intervals.
- (3) The high TOC pulses can be reproduced by enhancing the primary productivity ($600 \text{ gC m}^{-2} \text{ year}^{-1}$) or by restricting oxygen renewal (five times less than the initial oxygen level at the sea surface) over a time step of 100 kyr. In both scenarios, anoxic environments are reproduced at the water–sediment interface. The simulated TOC values reach 25 wt % for the primary productivity pulse and 13 wt % when assuming oxygen depletion, as against values of between 25 and 10 wt % for the pulses observed in the real case study.
- (4) Assuming a seaward stepwise decrease of primary productivity provides a more accurate TOC prediction.
- (5) A third organic-rich interval appears in the simulation for the Early Toarcian. There is no evidence from the study of this basin to corroborate this prediction.

Discussion of the simulation results leads to a number of conclusions concerning the evolution of organic matter and the key factors controlling its distribution and heterogeneity:

- (1) The 3D modelling approach allows us to incorporate a large amount of data and test multiple coupled processes. The simulation of organic matter sedimentation is an efficient tool for testing hypotheses of basin history, as well as predicting the source rock distribution and estimating the heterogeneity (TOC and mineralogy) of organic matter, whereas stochastic models are based solely on extrapolation.
- (2) Sedimentation rate and bathymetry appear to be the key factors influencing the deposition of continuous intervals moderately rich in organic matter. The highest TOC values are associated with a sedimentation rate of around 40 m Ma^{-1} and water depths $>50 \text{ m}$. More than 50% of the signal is reproduced (i.e. presence and thickness of organic-rich horizons and average TOC) without varying the other parameters.
- (3) However, the high TOC content pulses measured in the real case study cannot be fitted with simulations under the test conditions without assuming enhancement of primary productivity or depletion of oxygen levels.
- (4) Bioturbation is a factor that can lead to a major diminution of organic matter preservation. This process is not yet taken into account in the model.
- (5) In the case of the Toarcian, the high TOC probably implies organic matter transport to deeper parts of the basin and/or processes favouring organic matter

degradation such as oxygen renewal by turbidite activity or bottom currents.

This study also highlights the requirements and issues that remain to be addressed in the organic matter modelling approach:

- (1) Inputs of terrestrial organic matter and the correction of initial TOC are considered negligible for the Northern Lusitanian Basin, but these factors may have a higher impact in other basins. As a prior condition for the modelling, we probably require a characterization of palynofacies and a reconstruction of burial history.
- (2) The question of duration of TOC pulses and the significance of the time scale when comparing simulated and measured TOC values is open.

In our simulations, the main processes leading to moderately organic-rich deposits are sedimentation rate and basin geometry. The depositional environments of organic-rich sediments are compatible with many of the conceptual models currently proposed in the literature (Röhl & Schmid-Röhl, 2005). Some West Tethyan basins show Sinemurian and Pliensbachian organic-rich facies similar to those observed in the Lusitanian Basin. High oil-generating potential is recorded in the Lower Jurassic sequences of basins in the UK, France, Germany and Spain (e.g. Korte & Hesselbo, 2011; Silva *et al.*, 2011). This study highlights the need for a relative quantification assessment of the palaeo-environmental conditions and processes that led to the widespread accumulation of organic matter in north-western Europe.

ACKNOWLEDGEMENTS

DionisosFlow© is developed in the framework of the IFP Energies Nouvelles project DORS (“Dionisos Organic-Rich Sediment”). We are grateful to Auriane Bergerol, Brigitte Doligez, Bertrand Coureaud, Jean-François Deronzier, Jean-Pierre Barde, Laurent Riquier and Sébastien Rohais for constructive discussions. We also thank Florence Savignac and Marie Salpin for laboratory technical assistance and BeicipFranlab for support with DionisosFlow©. We wish to thank Tiago M. Alves, Alain-Yves Huc and an anonymous reviewer for their constructive remarks. Michael S.N. Carpenter post-edited the English style and grammar.

CONFLICT OF INTEREST

No conflict of interest declared.

SUPPORTING INFORMATION

Additional Supporting Information may be found in the online version of this article:

Figure S1. Lower Jurassic TOC distribution of Lusitanian Basin from Duarte *et al.*, 2010.

Figure S2. Palynofacies associations showing the relative abundance of the particulate organic matter, random vitrinite reflectance (%Rr) and TOC values from São Pedro de Moel and Peniche sections (from Ribeiro *et al.*, 2013).

Figure S3. Selected ratios, relative quantities of C27, C28 and C29 regular steranes and total percentages of saturated, aromatic and NSO compounds from São Pedro de Moel and Peniche sections.

REFERENCES

- ALVES, T.M., GAWTHORPE, R.L., HUNT, D.W. & MONTEIRO, J.H. (2002) Jurassic tectono-sedimentary evolution of the Northern Lusitanian Basin (offshore Portugal) *Mar. Petrol. Geol.*, **19**, 727–754.
- ALVES, T.M., GAWTHORPE, R.L., HUNT, D.W. & MONTEIRO, J.H. (2003) Post-Jurassic tectono-sedimentary evolution of the Northern Lusitanian Basin (Western Iberian margin). *Basin Res.*, **15**, 227–249.
- ALVES, T.M., MOITA, C., SANDNES, F., CUNHA, T., MONTEIRO, J.H. & PINHEIRO, M. (2006) Mesozoic–Cenozoic evolution of North Atlantic continental-slope basins: the Peniche basin, western Iberian margin. *Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull.*, **90**, 31–60.
- ALVES, T.M., MOITA, C., CUNHA, T., ULLNAESS, M., MYKLEBUST, R., MONTEIRO, J.H. & MANUPPELLA, G. (2009) Diachronous evolution of Late Jurassic–Cretaceous continental rifting in the northeast Atlantic (west Iberian margin). *Tectonics*, **28** (4), 1–32.
- ALZAGA-RUIZ, H., GRANJEON, D., LOPEZ, M., SERANNE, M. & ROURE, F. (2009) Gravitational collapse and Neogene sediment transfer across the western margin of the Gulf of Mexico: insights from numerical models. *Tectonophysics*, **470**, 21–41.
- AZEREDO, A.C., WRIGHT, P. & RAMALHO, R. (2002) The Middle–Late Jurassic forced regression and disconformity in central Portugal: eustatic, tectonic and climatic effects on a carbonate ramp system. *Sedimentology*, **49**, 1339–1370.
- AZEREDO, A.C., DUARTE, L.V., HENRIQUES, M.H. & MANUPPELLA, G. (2003) *Da dinâmica continental no Triásico aos mares do Jurássico Inferior e Médio*. Cadernos de Geologia de Portugal, Instituto Geológico e Mineiro, Lisboa, 43 pp.
- BASTVIKEN, D., PERSSON, L., ODHAM, G. & TRANVIK, L. (2004) Degradation of dissolved organic matter in oxic and anoxic lake water. *Limnol. Oceanogr.*, **49**, 109–116.
- BAUDIN, F. (1995) Depositional Controls on Mesozoic Source Rocks in the Tethys. In: *Paleogeography, Paleoclimate, and Source Rocks* (Ed. by Huc A.Y.) *Am. Assoc. Petrol. Geol. Mem.*, **40**, 191–211.
- BAUDIN, F., HERBIN, J.P. & VANDENBROUCKE, M. (1990) Mapping and geochemical characterization of the Toarcian organic matter in the Mediterranean Tethys and Middle East. *Org. Geochem.*, **16**, 677–687.
- BAUDIN, F., TRIBOVILLARD, N. & TRICHET, J. (2007) *Géologie de la matière organique*. (Ed. by Vuibert), 263 pp. Société Géologique de France, Paris.
- BERELSON, W.M. (2001) The Flux of Particulate Organic Carbon Into the Ocean Interior: a comparison of Four U.S. JGOFS Regional Studies. *Oceanography*, **14**, 59–67.
- BERGER, W.H., SMETACEK, V.S. & WEFER, G. (1989) Productivity of the Ocean: Present and Past. In: *Dahlem Workshop Report* (Ed. by Berger W.H., Smetacek V.S. & Wefer G.) *Life Sci. Res. Rep.*, **44**, Berlin, 1–34.
- BESSEREAU, G., GUILLOCHEAU, F. & HUC, A.Y. (1995) Source rock occurrence in a sequence stratigraphic framework: the example of the Lias of the Paris Basin. In: *Paleogeography, Paleoclimate, Ands Source Rocks* (Ed. by Huc A.Y.) *Am. Assoc. Petrol. Geol. Mem.*, **40**, 273–301.
- BETTS, J.N. & HOLLAND, H.D. (1991) The oxygen content of ocean bottom waters, the burial efficiency of organic carbon, and the regulation of atmospheric oxygen. *Global Planet. Change*, **97**, 5–18.
- BODIN, S., FRÖHLICH, S., BOUTIB, L., LAHSINI, S. & REDFERN, J. (2011) Early Toarcian source rock potential in the Central High Atlas Basin (Central Morocco): regional distribution and depositional model. *J. Petrol. Geol.*, **34**, 345–364.
- BURCHETTE, T.P. & WRIGHT, V.P. (1992) Carbonate ramp depositional systems. *Sed. Geol.*, **79**, 3–57.
- CANFIELD, D.E. (1993) Factors influencing organic carbon preservation in marine sediments. *Chem. Geol.*, **114**, 315–329.
- CARPENTIER, B., HUC, A.Y. & BESSEREAU, G. (1991) Wireline logging and source rocks – Estimation of organic carbon content by the Carbolog method. *Log Anal.*, **32**, 279–297.
- CARPENTIER, B., HUC, A.Y. & GUILHAUMOU, N. (1993) Geological and geochemical modeling, an approach for understanding organic cyclic sedimentation in evaporitic sequences. Application to the Mulhouse Basin (France). *Org. Geochem.*, **20**, 1153–1164.
- COMAS-RENGIFO, M.J., DUARTE, L.V., GOY, A., PAREDES, R. & SILVA, R.L. (2013) El Sinemuriense Superior (cronozonas Oxynotum y Raricostatum) en la región de S. Pedro de Moel (Cuenca Lusitánica, Portugal). Fácies carbonatadas ricas em matéria orgânica do Jurássico da Bacia Lusitânica. Novos contributos paleontológicos, sedimentológicos e geoquímicos. *Comunicações Geológicas*, **100**, 15–19.
- CSATO, I., GRANJEON, D., CATUNEANU, O. & BAUM, G.R. (2013) A three-dimensional stratigraphic model for the Messinian crisis in the Pannonian Basin, eastern Hungary. *Basin Res.*, **25**, 121–148.
- CULLING, W. (1960) Analytical theory of erosion. *J. Geol.*, **68**, 366–344.
- DUARTE, L.V. (1997) Facies analysis and sequential evolution of the Toarcian–Lower Aalenian series in the Lusitanian Basin (Portugal). *Comun. Inst. Geol. Mineiro, Lisboa*, **83**, 65–94.
- DUARTE, L.V. (2007) Lithostratigraphy, sequence stratigraphy and depositional setting of the Pliensbachian and Toarcian series in the Lusitanian Basin (Portugal). In: *The Peniche Section (Portugal), Contributions to the Definition of the Toarcian GSSP* (Ed. by R.B. Rocha), pp. 17–23. International Sub-commission on Jurassic Stratigraphy, Lisbon.
- DUARTE, L.V. & SOARES, A.F. (2002) Litostratigrafia das séries margo-calcárias do Jurássico Inferior da Bacia Lusitânica (Portugal). *Comun. Inst. Geol. Mineiro, Lisboa*, **89**, 135–154.
- DUARTE, L.V., WRIGHT, V.P., FERNANDEZ-LOPEZ, S., ELMÍ, S., KRAUTTER, M., AZEREDO, A.C., HENRIQUES, M.H., RODRIGUES, R. & PERILLI, N. (2004) Early Jurassic carbonate evolution in the Lusitanian Basin: facies, sequence stratigraphy and cyclicity. In: *Carboniferous and Jurassic Carbonate Platforms of Iberia* (Ed. by L.V. Duarte, M.H. Henriques) *23rd IAS*

- Meeting of Sedimentology, Coimbra 2004*, Field Trip Guide Book, 1, 45–71.
- DUARTE, L.V., OLIVEIRA, L.C.V., COMAS-RENGIFO, M.J., SILVA, F. & SILVA, R.L. (2010) Organic-Rich facies in the Sinemurian and Pliensbachian of the Lusitanian Basin, Portugal: total organic carbon distribution and relation to transgressive-regressive facies cycles. *Geologica Acta*, **8**, 325–340.
- DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA FILHO, J.G., RIBEIRO, N.P. & CHAGAS, R.B.A. (2012) High-resolution stratigraphy, palynofacies and source rock potential of the Agua de Madeiros formation (lower Jurassic), Lusitanian basin, Portugal. *J. Petrol. Geol.*, **35**, 105–126.
- DUARTE, L.V., COMAS-RENGIFO, M.J., SILVA, R.L., PAREDES, R. & GOY, A. (2014a) Carbon isotope stratigraphy and ammonite biostratigraphy across the Sinemurian-Pliensbachian boundary in the western Iberian margin. *Bull. Geosci.*, **89**, 719–736.
- DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA FILHO, J.G., AZEREDO, A.C., CABRAL, M.C., COMAS-RENGIFO, M.J., CORREIA, G., FERREIRA, R., LOUREIRO, I.M., PAREDES, R., PEREIRA, A. & RIBEIRO, N.P. (2014b) Advances in the Stratigraphy and Geochemistry of the Organic-Rich Lower Jurassic Series of the Lusitanian Basin (Portugal). In: *STRATI 2013* (Ed. By Rocha R., Pais J., Kullberg J.C. & Finney S.) *Springer Geol.*, 841–846.
- FALKOWSKI, P.G. & RAVEN, J.A. (2007) *Aquatic Photosynthesis*. 2nd edn. Blackwell Science, Malden, 488 pp.
- FARRIMOND, P., EGLINTON, G., BRASSEL, S.C. & JENKYN, H.C. (1989) Toarcian anoxic event in Europe: an organic geochemical study. *Mar. Petrol. Geol.*, **6**, 136–147.
- FERREIRA, R., MENDONÇA FILHO, J.G., DUARTE, L.V., SILVA, R.L. & MENDONÇA, J.O. (2010a) Variação organofaciológica na sucessão rica em matéria orgânica do Pliensbachiano de Peniche (Bacia Lusitânica, Portugal). In: *Actas X Congresso de Geoquímica dos Países de Língua Portuguesa/XVI Semana de Geoquímica* (Ed. by Flores D. & Marques M.) *Memórias*, **14**, Porto, 301–308.
- FERREIRA, R., MENDONÇA FILHO, J.G., DUARTE, L.V., SILVA, R.L. & MENDONÇA, J.O. (2010b) Hydrocarbon generation potential of the Pliensbachian organic-rich series of Peniche (Lusitanian Basin, Portugal): An organopetrographic and thermal maturation assessment integrated analysis. In: *II Central & North Atlantic Conjugate Margins Conference* (Ed. by Pena Dos Reis R. & Pimentel N.) *Ext. Abstr.*, **3**, Lisbon, 116–120.
- GARRETT, C. (1991) Marginal mixing theories. *Atmos. Ocean*, **29** (2), 313–339.
- GRANJEON, D. (1996) Modelisation stratigraphique deterministe – conception et applications d'un modele diffusif 3D multi-lithologique. Memoires Geosciences Rennes, PhD Dissertation, Geosciences Rennes, Rennes, France.
- GRANJEON, D. (2009) 3D stratigraphic modeling of sedimentary basins. AAPG Search and Discovery Article #90090©2009 Am. Assoc. Petrol. Geol. Annual Convention, Denver, Colorado.
- GRANJEON, D. (2014) 3D forward modelling of the impact of sediment transport and base level cycles on continental margins and incised valleys. In: *From Depositional Systems to Sedimentary Succession on the Norwegian Continental Margin* (Ed. by Martinus A.W., Ravnas R., Howell R.J., Steel R.J., & Womham J.P.) *Spec. Publ. Int. Assoc. Sedimentol.*, **46**, 453–472.
- GRANJEON, D. & CHAUVEAU, B. (2014) Sedimentary basin development method using stratigraphic simulation coupled with an organic matter production and degradation model. Brevet US20140163883 A1. 12-6-2014.
- GRANJEON, D. & JOSEPH, P. (1999) Concepts and applications of a 3-D multiple lithology, diffusive model in stratigraphic modeling. In: *Numerical Experiments in Stratigraphy: Recent Advances in Stratigraphic and Sedimentologic Computer Simulations* (Ed. by Harbaugh J.W., Watney W.L., Rankey E.C., Slingerland R. & Goldstein R.H.) *Geol. Soc. Spec. Publ.*, **62**, 197–210.
- GRANJEON, D. & WOLF, S. (2007) 3D stratigraphic modeling in complex tectonics area. AAPG Search and Discover Article #90063©2007 Am. Assoc. Petrol. Geol. Annual Convention, Long Beach, California.
- HONJO, S., MANGANINI, S.J., KRISHFIELD, R.A. & FRANCOIS, R. (2008) Particulate organic carbon fluxes to the ocean interior and factors controlling the biological pump: a synthesis of global sediment trap programs since 1983. *Prog. Oceanogr.*, **76**, 217–285.
- JENKYN, H.C. (1988) The Early Toarcian (Jurassic) anoxic event: stratigraphic, sedimentary and geochemical evidence. *Am. J. Sci.*, **288**, 101–151.
- JENKYN, H. (2010) The geochemistry of Oceanic Anoxic Events. *Geochem. Geophys. Geosyst.*, **11**(3), 1–30.
- KATZ, B.J. & PRATT, L.M. (1993) *Sources Rocks in a Sequence Stratigraphic Framework*. AAPG Stud. Geol., Tulsa, **37**, 247 pp.
- KORTE, C. & HESSELBO, S.P. (2011) Shallow marine carbon and oxygen isotope and elemental records indicate icehouse-greenhouse cycles during the Early Jurassic. *Paleoceanography*, **26**, PA4219.
- LEINFELDER, R.R. & WILSON, R.C.L. (1998) Third-order sequences in an Upper Jurassic Rift-related second-order sequence, Central Lusitanian Basin, Portugal. In: *Mesozoic and Cenozoic Sequence Stratigraphy of European Basins* (Ed. by Graciansky P.C., Hardenbol J., Jacquin T. & Vail P.R.) *Soc. Econ. Palaeontol. Mineral. Special Publication*, **60**, 507–525.
- MANN, U. & STEIN, R. (1997) Organic facies variations, source rock potential, and sea level changes in Cretaceous black shales of the Quebrada Ocal, Upper Magdalena Valley. *Colombia. Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull.*, **81**, 556–576.
- MANN, U. & ZWIGEL, J. (2008) Modeling source-rock distribution and quality variations: the organic facies modelling approach. *Spec. Publ. Int. Assoc. Sedimentol.*, **40**, 139–274.
- MARTIN, J.H., KNAUER, G.A., KARL, D.M. & BROENKOW, W.W. (1987) VERTEX: carbon cycling in the northeast Pacific. *Deep-Sea Res.*, **34**, 267–285.
- MAUFFRET, A., MOUGENOT, D., MILES, P.R. & MALOT, J.A. (1989) Cenozoic deformation and Mesozoic abandoned spreading center in the Tagus Abyssal Plain (West Portugal): results of a multichannel seismic survey. *Can. J. Earth Sci.*, **26**, 1101–1123.
- MEISTER, C. (2010) Worldwide ammonite correlation at the Pliensbachian Stage and Substage Boundaries (Lower Jurassic). *Stratigraphy*, **7**, 83–101.
- MOUTERDE, R. (1967) Le Lias du Portugal. Vue d'ensemble et division en zones. *Comunicações dos Serviços Geológicos de Portugal*, **52**, 209–226.
- MOUTERDE, R., ROCHA, R.B. & DELANCE, J. (1981) Atlas des fossiles caractéristiques du Lias portugais. *Ciências da Terra*, **6**, 49–76.
- NORDLUND, U. (1996) Formalizing geological knowledge – With an example of modeling stratigraphy using fuzzy logic. *J. Sediment. Res.*, **66**, 689–698.

- OGG, J.G. & HINNOV, L.A. (2012) Jurassic. In: *The Geologic Time Scale, 2012* (Ed. by F.M. Gradstein, J.G. Ogg, M.D. Schmitz, G. Ogg), pp. 731–791. Elsevier, Oxford, Amsterdam, Waltham.
- OLIVEIRA, L.C., RODRIGUES, R., DUARTE, L.V. & LEMOS, V. (2006) Avaliação do potencial gerador de petróleo e interpretação paleoambiental com base em biomarcadores e isótopos estáveis do carbono da seção Pliensbaquiano-Toarciano inferior (Jurássico inferior) da região de Peniche (Bacia Lusitânica, Portugal). *Bol. Geociências da Petrobras*, **14**, 207–234.
- PASLEY, M.A., RILEY, G.W. & NUMMEDAL, D. (1993) Sequence stratigraphy significance of organic matter variations: Example from the Upper Cretaceous Mancos Shale of the San Juan Basin, New Mexico. In: *Source Rocks in a Sequence Stratigraphic Framework* (Ed. by Katz B.J. & Pratt L.M.) *AAPG Stud. Geol.*, Tulsa, 221–241.
- PASSEY, Q.R., CREANEY, S., KULLA, J.B., MORETTI, F.J. & STROUD, J.D. (1990) A practical model for organic richness from porosity and resistivity logs. *Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull.*, **74**, 454–466.
- PILSON, M.E.Q. (2012) *An Introduction to the Chemistry of the sea*. Cambridge University Press, New York, pp. 287–294.
- PLANCQ, J., MATTIOLI, E., PITTET, B., BAUDIN, F., DUARTE, L.V., BOUSSAHA, M. & GROSSI, V. (2016) A calcareous nannofossil and organic geochemical study of marine palaeoenvironmental changes across the Sinemurian/Pliensbachian (early Jurassic, ~191 Ma) in Portugal. *Palaeogeogr. Palaeoclimatol. Palaeoecol.*, **449**, 1–12.
- RABINEAU, M., BERNE, S., ASLANIAN, D., OLIVET, J.-L., JOSEPH, P., GUILLOCHEAU, F., BOURILLET, J.-F., LEDREZEN, E. & GRANJEON, D. (2005) Sedimentary sequences in the Gulf of Lion: a record of 100,000 years climatic cycles. *Mar. Petrol. Geol.*, **22**, 775–804.
- RASMUSSEN, E.S., LOMHOLT, S., ANDERSEN, C. & VEJBAEK, O.V. (1998) Aspects of the structural evolution of the Lusitanian basin in Portugal and the shelf and slope area offshore Portugal. *Tectonophysics*, **300**, 199–225.
- REIS, R.P.B.P., PROENÇA CUNHA, P., DINIS, J.L. & TRINCÃO, P.R. (2000) Geological evolution of the Lusitanian Basin (Portugal) during the Late Jurassic. *GeoRes. Forum*, **6**, 345–356.
- RIBEIRO, N.P., MENDONÇA, J.G., DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA, J.O. & SILVA, T.F. (2013) Palynofacies and organic geochemistry of the Sinemurian carbonate deposits in the western Lusitanian Basin (Portugal): Coimbra and Agua de Madeiros formations. *Int. J. Coal Geol.*, **111**, 37–52.
- ROERING, J.J., KIRCHNER, J.W. & DIETRICH, W.E. (1999) Evidence for nonlinear, diffusive sediment transport on hillslopes and implications for landscape morphology. *Water Resour. Res.*, **35**, 853–870.
- RÖHL, H.J. & SCHMID-RÖHL, A. (2005) Lower Toarcian (upper liassic) black shales of the central European epicontinental basin: a sequence stratigraphic case study from the SW German Posidonia shale. *SPM Spec. Publ.*, **82**, 165–189.
- ROMERO-SARMIENTO, M., DUCROS, M., CARPENTIERA, B., LORANT, F., CACAS, M.-C., PEGAZ-FIORNET, S., WOLF, S., ROHAIS, S. & MORETTI, I. (2013) Quantitative evaluation of TOC, organic porosity and gas retention distribution in a gas shale play using petroleum system modeling: application to the Mississippian Barnett Shale. *Mar. Petrol. Geol.*, **45**, 315–330.
- SATHYENDRANATH, S. & PLATT, T. (2013) Primary Production Distribution. Reference Module in Earth Systems and Environmental Sciences, 2013, Current as of 24 November 2014.
- SCHIEBER, J., SOUTHARD, J. & THAISEN, K. (2007) Accretion of Mudstone Beds from Migrating Floccule Ripples. *Science*, **318**, 1760–1763.
- SCHWARZKOPF, T.A. (1993) Model for prediction of organic carbon content in possible source rocks. *Mar. Petrol. Geol.*, **10**, 478–491.
- SILVA, R.L. & DUARTE, L.V. (2015) Organic matter production and preservation in the Lusitanian Basin (Portugal) and Pliensbachian climatic hot snaps. *Global Planet. Change*, **131**, 24–34.
- SILVA, R.L., DUARTE, L.V., COMAS-RENGIFO, M.J., MENDONÇA FILHO, J.G. & AZERÊDO, A.C. (2011) Update of the carbon and oxygen isotopic records of the Early–Late Pliensbachian (Early Jurassic, ~187 Ma): insights from the organic-rich hemipelagic series of the Lusitanian Basin (Portugal). *Chem. Geol.*, **283**, 177–184.
- SILVA, R.L., MENDONÇA FILHO, J.G., DA SILVA, F.S., DUARTE, L.V., SILVA, T.F., FERREIRA, R. & AZERÊDO, A.C. (2012) Can biogeochemistry aid in the palaeoenvironment/early diagenesis reconstruction of the ~187 Ma (Pliensbachian) organic-rich hemipelagic series of the Lusitanian Basin (Portugal)? *Bull. Geosci.*, **87**, 373–382.
- SILVA, R.L., DUARTE, L.V. & COMAS-RENGIFO, M.J. (2015) Carbon isotope chemostratigraphy of Lower Jurassic carbonate deposits, Lusitanian Basin (Portugal): implications and limitations to the application in sequence stratigraphic studies. In: *Chemostratigraphy: Concepts, Techniques and Applications* (Ed. by M. Ramkumar), pp. 341–371. Elsevier, New York.
- SOARES, A.F., ROCHA, R.B., ELM, S., HENRIQUES, M.H., MOUTERDE, R., ALMERAS, Y., RUGET, G., MARQUES, J., DUARTE, L.V., CARAPITO, C. & KULLBERG, J.C. (1993) Le sous-bassin nord-lusitanien (Portugal) du Trias au Jurassique moyen: histoire d’un “rift avorté”. *C. R. Acad. Sci. Paris*, **317**, 1659–1666.
- STECKLER, M.S., SWIFT, D.J.P., SYVITSKI, J.P., GOFF, J.A. & NIEDORODA, A.W. (1996) Modeling sedimentology and stratigraphy of continental margins. *Oceanography*, **9**, 183–188.
- SUAN, G., MATTIOLI, E., PITTET, B., LECUYER, C., SUCHERAS-MARX, B., DUARTE, L.V., PHILIPPE, M., REGGIANI, L. & MARTINEAU, F. (2010) Secular environmental precursors to Early Toarcian (Jurassic) extreme climate changes. *Earth Planet. Sci. Lett.*, **290**, 448–458.
- SYVITSKI, J.P.M. & HUTTON, E.W.H. (2001) 2D SEDFLUX 1.0C: an advanced process-response numerical model for the fill of marine sedimentary basins. *Comp. Geosci.*, **27**, 731–753.
- TETZLAFF, D.M. (1989) SEDO: A simple clastic sedimentation program for use in training and education. In: *Quantitative Dynamic Stratigraphy* (Ed. by A.T. Cross), pp. 401–415. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- THIERRY, J. (2010) Paleogeographic map of Late Sinemurian. In: *Atlas Peri-Tethys Palaeogeographical Maps* (Ed. by Dercourt J., Gaetani M., Vrielynck B., Barrier E., Biju-Duval B., Brunet M.F., Cadet J.P., Crasquin S. & Sandulescu M.) Peri-Tethys Programme, 1 map. no qry
- THIERRY, J. & BARRIER, E. (2010) Paleogeographic map of Middle Toarcian. In: *Atlas Peri-Tethys Palaeogeographical Maps* (Ed. by Dercourt J., Gaetani M., Vrielynck B., Barrier E.,

- Biju-Duval B., Brunet M.F., Cadet J.P., Crasquin S. & Sandulescu M.) Peri-Tethys Programme, 1 map.
- TYSON, R.V. (1995) *Sedimentary Organic Matter: Organic Facies and Palynofacies*. Chapman and Hall, London, 615 pp.
- TYSON, R.V. (1996) Sequence-stratigraphical interpretation of organic facies variations in marine siliclastic systems: General principles and application to the onshore Kimmeridge Clay Formation, UK. S. P. In: *Sequence Stratigraphy in British Geology* (Ed. by Hesselbo S.P. & Parkinson D.N.) *Geol. Soc. Spec. Publ.*, **103**, 75–96.
- WIGNALL, P.B. (1994) *Black Shales*. Oxford Monographs on Geology and Geophysics, 30, 97.
- WILSON, R.C.L., HISCOTT, R.N., WILLIS, M.G. & GRADSTEIN, F.M. (1989) The Lusitanian Basin of west-central Portugal: Mesozoic and Tertiary tectonic, stratigraphic and subsidence history. In: *Extensional Tectonics and Stratigraphy of the North Atlantic Margin* (Ed. by Tankard A.J. & Balkwill H.R.) *AAPG Memoir*, **46**, 341–361.
- WRIGHT, V.P. & WILSON, R.C.L. (1984) A Carbonate Submarine-Fan Sequence from the Jurassic of Portugal. *J. Sediment. Petrol.*, **54**, 394–412.
- ZONNEVELD, K.A.F., VERSTEEGH, G.J.M., KASTEN, S., EGLINTON, T.I., EMEIS, K.-C., HUGUET, C., KOCH, B.P., DE LANGE, G.J., DE LEEUW, J.W., MIDDELBURG, J.J., MOLLENAUER, G., PRAHL, F.G., RETHMEYER, J., & WAKEHAM, S.G. (2010) Selective preservation of organic matter in marine environments; processes and impact on the sedimentary record. *Biogeosciences*, **7**, 483–511.

Manuscript received 24 June 2015; In revised form 20 May 2016; Manuscript accepted 15 July 2016.

Conclusion

Cette première étude numérique a permis de quantifier le comportement des différents processus complexes et interconnectés gouvernant la distribution et les hétérogénéités de la matière organique dans le cas d'un petit bassin sédimentaire en domaine épicontinental. Cette approche nécessite cependant un grand nombre de données et un cadre chronostratigraphique clairement défini. Outre les conclusions proposées dans l'article, un certain nombre de points importants a été soulevé au travers de cette étude.

Dans le cas du bassin Lusitanien, l'effet prépondérant de la morphologie du bassin, au travers des taux de sédimentation et de la bathymétrie, a été mis en avant dans la distribution et la conservation de la matière organique. Cette forte influence de la morphologie conduit à s'interroger sur l'effet du transport de la matière organique (qui a le comportement de particules silteuses dans cette étude). La taille relativement modeste du bassin Lusitanien et sa morphologie de rampe homoclinale très similaire sur toute sa bordure, limitent la distinction et la quantification de l'impact du transport.

Par ailleurs, l'estimation de la productivité primaire à l'Actuel présente de nombreux biais comme expliqué dans le **Chapitre 1**. L'estimation des paléo-productivités soulève donc un certain nombre de questions. Les proxies enregistrant la productivité primaire sont peu nombreux et leur enregistrement dépend également du niveau d'oxygénation (e.g. quantité de phosphate dans le sédiment). Il est également difficile d'évaluer la pertinence d'une valeur de productivité primaire moyennée sur un pas de temps de plusieurs milliers d'années. Cependant, cette étude a montré qu'en utilisant une productivité primaire le long de la côte constante dans le temps et une diminution par rapport à la distance à cette côte, les niveaux riches en matière organique étaient simulés conformément aux données de terrain. Cette approche permet de retrouver efficacement la distribution globale de la matière organique dans les sédiments.

En outre, la calibration précise des variations haute fréquence du TOC semble nécessiter des fluctuations au cours du temps de la productivité primaire et/ou du niveau d'oxygénation. Ces variations sont difficiles à modéliser car le TOC simulé représente une valeur moyenne sur l'épaisseur déposée au cours d'un pas de temps. Or plusieurs variations peuvent avoir lieu sur un même pas de temps. Les simulations effectuées montrent que, même en diminuant le pas de temps et en reproduisant les variations du TOC, il est difficile de favoriser une hypothèse. En effet, les intervalles présentant une probable diminution du niveau d'oxygène observés sur le terrain peuvent être modélisés soit par une diminution du niveau d'oxygénation du bassin, soit grâce à une forte productivité primaire entraînant une consommation de l'oxygène.

D'autre part, les différentes simulations ont montré que certains paramètres non-pris en considération peuvent avoir un effet sur l'estimation de la quantité de matière organique préservée. C'est par exemple le cas des événements gravitaires ou de la bioturbation liée aux organismes fousseurs.

L'ensemble de ces observations et conclusions a orienté la façon dont ont été menées les études suivantes.

CHAPITRE 5 – ETUDE DES BASSINS NORD-EUPEENS

Introduction

La première étude ayant montré la pertinence du modèle numérique dans le cas d'un petit bassin épicontinental, cette deuxième étude a été conduite sur une surface beaucoup plus vaste.

Le domaine Nord européen a été retenu pour cette étude. Il s'agit plus particulièrement de la surface recouvrant les bassins de Paris, Aquitain, du Sud-Est et l'English Channel Basin, séparés par un certain nombre de seuils (e.g. Poitou, Bresse-Jura) et de terres émergées (massif du London-Brabant, massif Armoricaïn et massif Central). De nombreuses études ont été publiées et apportent une description précise de la lithologie et un cadre chronostratigraphique détaillé pour ces différents bassins. Plusieurs niveaux riches en matière organique ont été également décrits. Cependant ces niveaux ne sont pas tous synchrones et leur contenu organique présente de grandes hétérogénéités témoignant de modalités différentes pour chaque bassin en termes de production primaire / conservation de la matière organique.

L'objectif de cette seconde étude est de vérifier l'influence de la morphologie et de l'évolution des différents bassins et seuils sur la distribution et les hétérogénéités de la matière organique. Le modèle couvrant une grande surface, l'influence du transport est également étudiée de manière plus approfondie que la première étude.

.1 3D stratigraphic forward numerical modelling approach for prediction of organic-rich deposits and their heterogeneities

Article 2, soumis le 16 août 2016 dans le journal **Marine and Petroleum Geology**.

3D stratigraphic forward numerical modelling approach for prediction of organic-rich deposits and their heterogeneities

Benjamin Bruneau ^{a,b,*}, Benoit Chauveau ^c, François Baudin ^a and Isabelle Moretti ^b

^a *Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, Institut des Sciences de la Terre de Paris (ISTeP), 4 place Jussieu 75005 Paris, France*

^b *ENGIE, Paris, France*

^c *IFP Energies Nouvelles, Rueil-Malmaison, France*

* Corresponding author. UPMC Paris 06, UMR 7193, ISTeP, 75005, Paris, France. *E-mail address:* benjamin.bruneau@upmc.fr (B. Bruneau)

Highlights:

- First 3D process-oriented model of organic matter in Lower Jurassic European basins
- Influence of paleogeography and slope geometry on the source rock characteristics
- Organic matter distribution/heterogeneity processes are identified and quantified

Keywords:

Petroleum Source Rock; Paris Basin; Liassic; Basin Modelling

ABSTRACT

The source rock characteristics (e.g. thickness, lateral extension, richness) are known to be highly variable in both time and space. The Lower Jurassic formations of north-western Europe contain source rocks with organic-rich intervals showing different characteristics from one region to another: the Paris Basin differs from the South-East Basin of France, but organic content and hydrogen index also vary within a single basin. During the Lower Jurassic, the depositional environment of north-western Europe corresponded to an epicontinental domain at the western extremity of the Tethys Ocean. The transgressive phase of the Lower Jurassic induced flooding of this European realm. Because of the evolution of the connections and sills of the European basins and their associated sedimentary settings, this domain occupied a key position for the deposition of organic-rich layers. Using a forward modelling approach, we aim to predict the heterogeneous characteristics of such sediments. It is widely accepted that preservation and primary productivity are key factors favouring the accumulation of organic-rich layers. However, the role of these factors remains to be assessed and the processes leading to accumulation and preservation need to be quantified.

We focus on the Lower Jurassic (Hettangian to Toarcian) in France and neighbouring countries, since this provides a vast amount of data to calibrate the 100-kyr time step model in terms of an accurate framework including paleogeography, stratigraphy, lithology, palaeontology, mineralogy and geochemistry.

Results show that favourable conditions for the deposition of organic-rich sediment can occur even with moderate primary productivity and without requiring anoxic conditions. These windows are firstly dependent on internal causes directly linked to the basin morphology, such as sedimentation rate, bathymetry and distance from the coastline. We do not need to evoke external causes such as oceanic anoxic events or enhancement of primary production to account for the deposition of organic-rich sediments.

1. Introduction

Several organic-rich layers were deposited in the north-western European basins during the Lower Jurassic due to their key position in an epicontinental sea at the north-western tip of the Tethys Ocean (e.g. [Fleet et al., 1987](#); [Korte and Hesselbo, 2011](#); [Silva et al., 2011](#)) ([Fig. 1](#)). Since the area was rather flat, the size and geometry of the basins were strongly dependent on sea-level variations. While only a few areas remained continuously above sea level, others emerged from time to time, leading to the development of sills that allowed temporary isolation of the north-western European seas from the open ocean. The area was located at the western extremity of the domain affected by opening of the Tethys Ocean as well at the north-eastern margin of the future Atlantic Ocean between North America and Africa/north-western Europe. Although this domain was only weakly affected by rifting, some small extensional faults are observed bordering the depocentres ([Fig. 1](#)). The transgressive phase of the Lower Jurassic occurred during sedimentation of the organic-rich deposits. Pre-existing crustal heterogeneities (related to age of the lithosphere and faulting) induced differential responses to the sedimentary loading. As a result, the bathymetry, connections and sills of the European basins evolved rapidly during the transgression, and their sedimentary settings changed along with the conditions that favoured the formation of organic-rich source rocks.

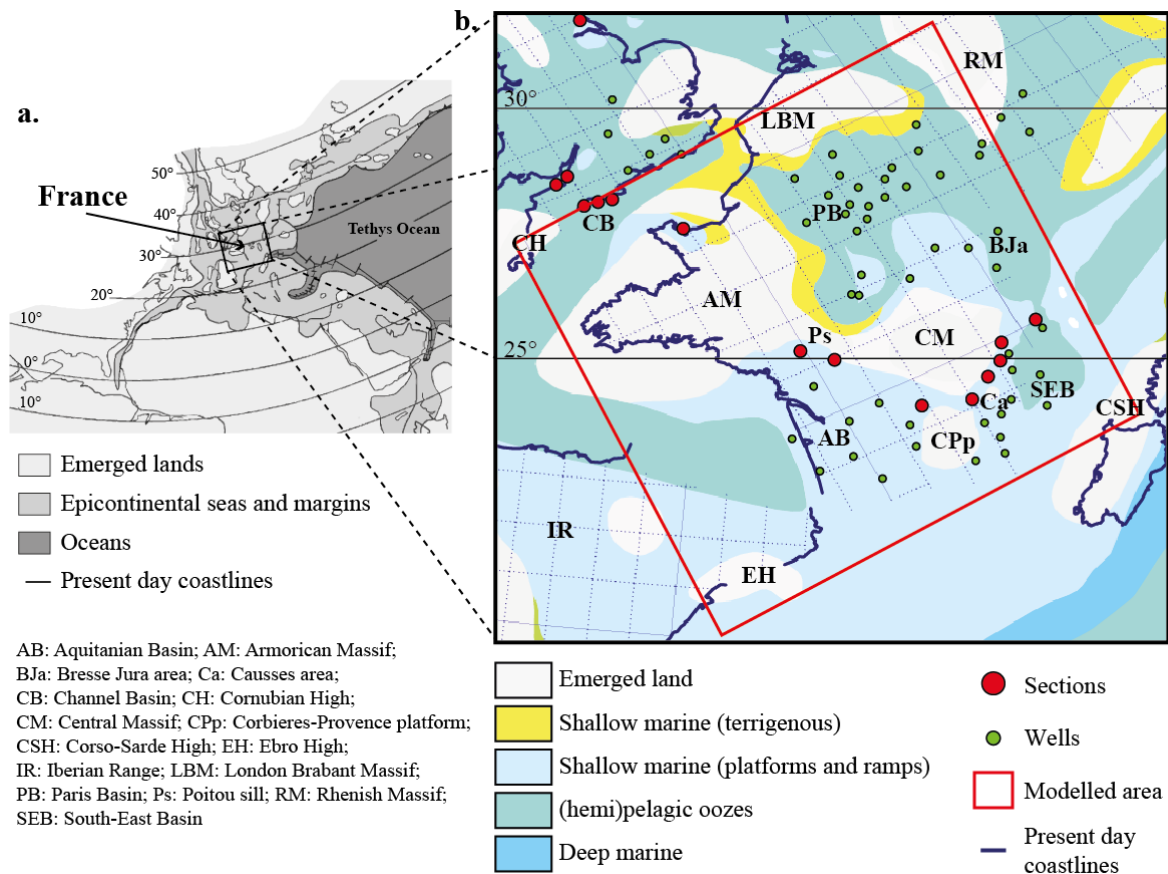


Fig. 1. *a.* Paleogeography of the western margin of Tethys Ocean during the Early Jurassic (modified after [Baudin et al., 1990](#)). *b.* Paleogeography of the Upper Sinemurian (modified after [Thierry et al., 2000](#)). Red and green dots indicate the studied sections and wells.

Many studies have been carried out on Toarcian source-rocks in north-west Europe (e.g. [Fleet et al., 1987](#); [Bessereau et al., 1992](#)), but less research has been focused on several other organic-rich deposits present throughout the Lower Jurassic. In the case of the Paris Basin, where the petroleum system is relatively prolific, a synthesis of the results allows an overview of the thicknesses and richness of the three main organic-rich intervals ([Bessereau et al., 1995](#); [Fig. 2](#)).

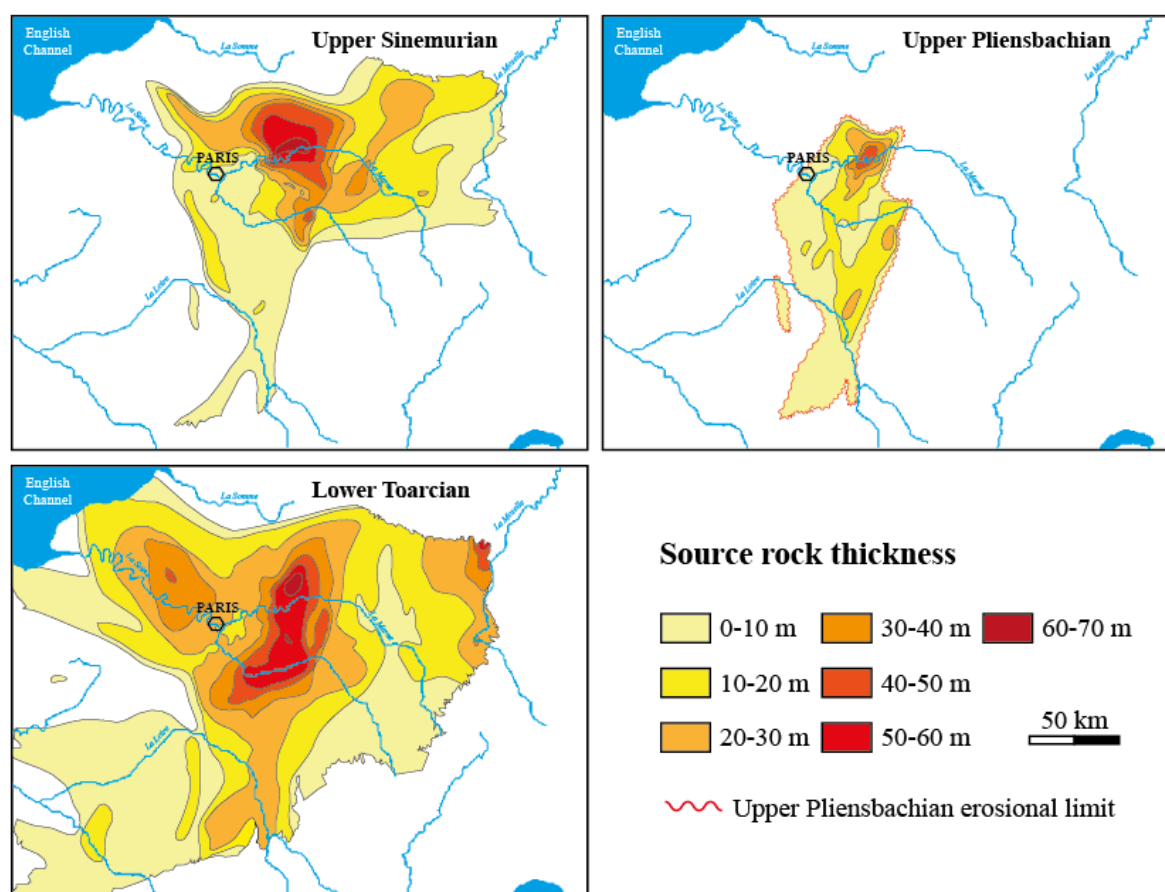


Fig. 2. Thickness variations of the three main Lower Jurassic source rocks of the Paris Basin. The thicknesses are computed from the cumulative thicknesses of intervals with TOC > 1 wt % (modified after Bessereau et al., 1992; Delmas et al., 2002).

The spatial and temporal distribution and characteristics (such as the Total Organic Content (TOC)) of these organic-rich source rocks result from a complex interaction between the processes that lead to organic matter deposition, i.e.: primary production, transport, sedimentation, burial and degradation of organic matter. Previously, these processes were studied using specific approaches, by taking into account empirical equations or physical laws defined in the literature (e.g. Martin et al., 1987; Betts and Holland, 1991; Mann and Zweigel, 2008). Tyson (1996) proposed a theoretical model including all these processes. On the contrary, regular opposite models are those which assume that processes associated with anoxia lead to organic-rich deposits, and those where primary productivity is the main factor explaining high organic matter contents. In these conceptual models, different factors could be involved such as the presence of sills (e.g. Pompeckj, 1901; Röhl and Schmid-Röhl, 2005), basin topography (e.g. Hallam and Bradshaw, 1979; Wignall, 1991; Röhl and Schmid-Röhl, 2005), variations of sea level and primary productivity (e.g. Wignall, 1991; Röhl and Schmid-Röhl, 2005) and oceanic anoxic events (e.g. Schlanger and Jenkyns, 1976). Although the theoretical model has been improved over recent decades, highlighting the relationships between the processes involved and empirical equations, there have been only few advanced numerical modelling studies (e.g. Steckler et al., 1996; Nordlund, 1996; Syvitski and Hutton, 2001; Mann and Zweigel, 2008; Bruneau et al., 2016a). Thus, despite all the research carried out to date, the history of organic matter deposition processes need to be integrated into a 3D forward model

to allow the identification and quantification of the key factors responsible for the heterogeneity of organic-rich deposits.

Our goal is to explore how regional tectonics, relative sea-level changes, primary production, environmental conditions, sedimentation, morphology and other parameters influence the distribution and heterogeneity of organic matter in sediments, as well as identify and quantify the key processes.

For this purpose, we focus on north-western Europe where four main basins developed during the Early Jurassic (English Channel Basin, Paris Basin, Aquitaine Basin and South-East Basin) separated by sills (e.g. Poitou sill, Bresse-Jura area) from three main emerged land masses (London-Brabant Massif, Armorican Massif and Central Massif) (Fig. 1). This case study allows us to define various conditions for the deposition of organic-rich sediments. A 3D stratigraphic forward model of this area (1,000*1,000 km) from the Hettangian to the Toarcian was computed with a 0.1-Myr time step. We used the DionisosFlow© software (Granjeon, 1996, 2009; Granjeon and Joseph, 1999; Granjeon and Wolf, 2007) and its new module, which includes the simulation of organic matter contents (Granjeon and Chauveau, 2014; Bruneau et al., 2016a). The validity of the model was ensured with data compiled from IFP Energies Nouvelles and ENGIE legacy databases containing field and well studies and geochemical/mineralogical analyses.

Using this new 3D approach, we study the processes that lead to the heterogeneity of organic-rich deposits (Fig. 3) as well as the interactions between these processes. Such an approach represents a step forward in our ability to make accurate predictions of source-rock distribution and quality.

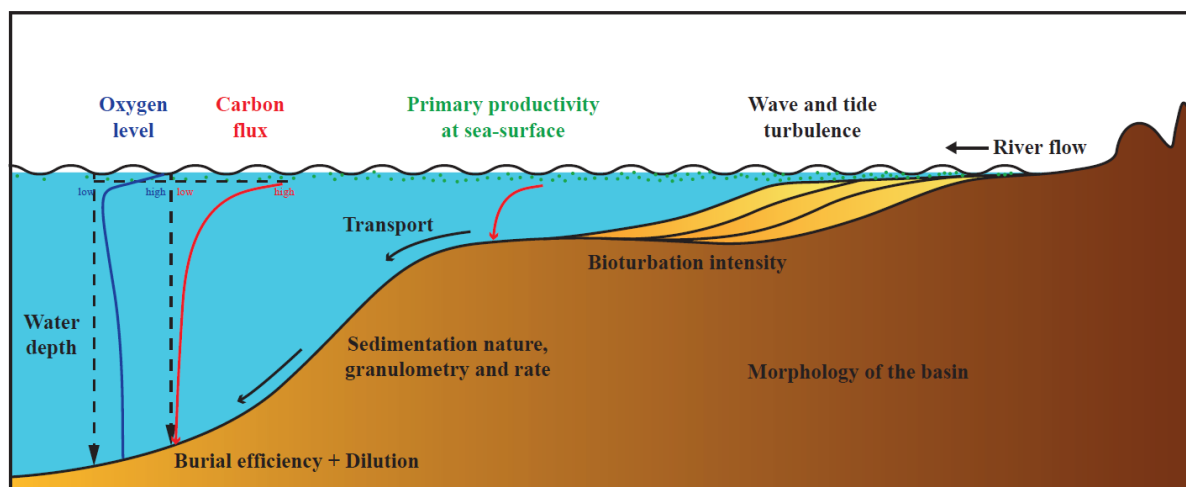


Fig. 3. Main processes affecting organic matter history, as simulated in DionisosFlow Organic-Rich Sediment (modified after Tyson, 1995). Primary productivity at the sea-surface is the first step in the production of organic matter and is dependent on nutrient availability, which is itself dependent on climate, upwelling, run off, vegetation cover and morphology of the catchment area. This organic matter, which is exported in the form of flocs settling from the photic zone (carbon flux), is partly consumed by other organisms in the food-chain. Once the organic remaining matter reaches the seafloor, it is eventually transported and buried. The amount of organic matter preserved after the first few metres of burial (i.e. during early diagenesis) is called burial efficiency; this parameter is mainly controlled by the sedimentation rate and local oxygen level/redox conditions. Modelling of these processes allows us to compute a theoretical initial TOC after the first few metres of burial of the marine organic matter fraction.

The global data set shows that organic-rich deposits are not equally distributed in time. Three main periods appear to account for the deposition of about 80% of organic-rich sediments giving rise to marine source rocks (end-Devonian, Jurassic and Late Cretaceous). Global oceanic anoxic events have been proposed to explain some of these synchronous deposits (e.g. [Schlanger and Jenkyns, 1976](#)). However, as discussed by these authors (op. cit.), when using a higher resolution for the time frame, the source rocks do not appear quite so synchronous and other parameters influence the deposition and preservation of organic matter, such as the morphology of the basin and the sedimentation rate.

2. Dataset

The study area covers an area of 1,000*1,000 km extending over the whole of France ([Fig. 1](#)), and lays particular emphasis on the Lower Jurassic interval from the Lower Hettangian (201.3 Ma) to the Upper Toarcian (174.2 Ma) ([Fig.4](#)).

Chronostratigraphy			Ammonite Biozonation	Top age (Ma)
	AALENIAN			
LOWER JURASSIC	TOARCIAN	UPPER	Aalensis	174.2
			Meneghini / Pseudoradosa	174.4
			Speciosum / Dispersum / Insigne	174.7
			Bonarellii / Thouarsense	175.0
		MIDDLE	Gradata / Variabilis	176.2
			Bifrons	178.2
		LOWER	Levisonis / Serpentinus / Falciferum	180.4
			Polymorphum / Tenuicostatum	181.7
	PLIENSBACHIAN	UPPER	Spinatum / Emaciatum	182.7
			Margaritatus / Algovianium	183.5
		LOWER	Davoei	187.6
			Ibex	188.5
			Jamesoni	189.4
	SINEMURIAN	UPPER	Raricostatum	190.8
			Oxynotum	192.8
			Obtusum	193.8
		LOWER	Turneri	195.3
			Semicostatum	196.3
			Bucklandi	197.8
	HETTANGIAN	UPPER	Angulata	199.3
		MIDDLE	Liasicus	200.1
		LOWER	Planorbis	200.9
	RHAETIAN			201.3

[Fig.4](#). Chronostratigraphic chart for the Lower Jurassic series of the north-western European basins. The ages given for the top of Ammonite Zones are from [Ogg and Hinnov \(2012\)](#). The different names for ammonite biozones in the same time interval refer to different basins.

The study is based on data from outcrops and boreholes in the different basins (red and green dots in [Fig. 1](#)), including structural setting, biostratigraphy, sedimentary characterization and mineralogical/geochemical analyses (29 wells including wireline logging, 12 carbologs, and more than 3000 Rock-Eval and mineralogical analyses). This dataset is built from the compilation of numerous studies cited below as well as our own field and laboratory investigations. These data are summarized in the geological setting section. They are used in the model for calibration and chronostratigraphic, lithological and geochemical control.

3. Geological setting

In term of paleogeography, the north-western domain corresponds to a shallow marine area subdivided into individual basins (e.g. Paris Basin, Aquitaine Basin) ([Fig. 1](#)). This wide epicontinental domain contrasts with the deeper and more open domain of the south-eastern part of Europe closer to Tethys (e.g. South-East Basin) ([Fig. 1](#)). Both areas are fundamentally different in term of water depth, depositional conditions and paleontological content of the series.

3.1 Structural and stratigraphic setting

The pivotal position of Europe during the opening of the Tethys and Atlantic oceans led its structural development ([Fig. 1](#)). Many horsts and grabens define areas of subsiding basins and areas of structural highs or emerged lands ([Fig. 1](#)) (e.g. [Bernoulli and Jenkyns, 1974](#); [Bassoulet and Baudin, 1994](#); [Dromart et al., 1996](#)). The structural heterogeneities induced differential responses to the sedimentary loading and the soft extensional tectonic context led to the reactivation of some faults which localize the subsidence (e.g. [Wilson et al., 1989](#); [Kullberg et al., 2001](#)). Although some lower order cycles are defined (e.g. [Guillocheau et al., 2000](#)) that are often specific to each basin, two second-order cycles can nevertheless be observed in most of the basins (e.g. [Hardenbol et al., 1998](#); [Guillocheau et al., 2000](#)) ([Fig. 5](#)). The first cycle corresponds to a regressive episode at the end of the Pliensbachian, coming to an end at the Pliensbachian - Toarcian boundary. This episode is marked by a non-deposition in the proximal parts and limestone deposits in the distal parts of the basins. The transgressive second-order cycle following this regressive episode marks the maximum flooding of the Liassic transgression and is observable throughout Europe in the lower Toarcian. This surface marks the maximum flooding of European platforms and the beginning of the Toarcian anoxic episode (T-OAE) (e.g. [Hesselbo et al., 2007](#)). A further regressive phase recorded by oolitic deposits across Europe marks the end of the Early Jurassic.

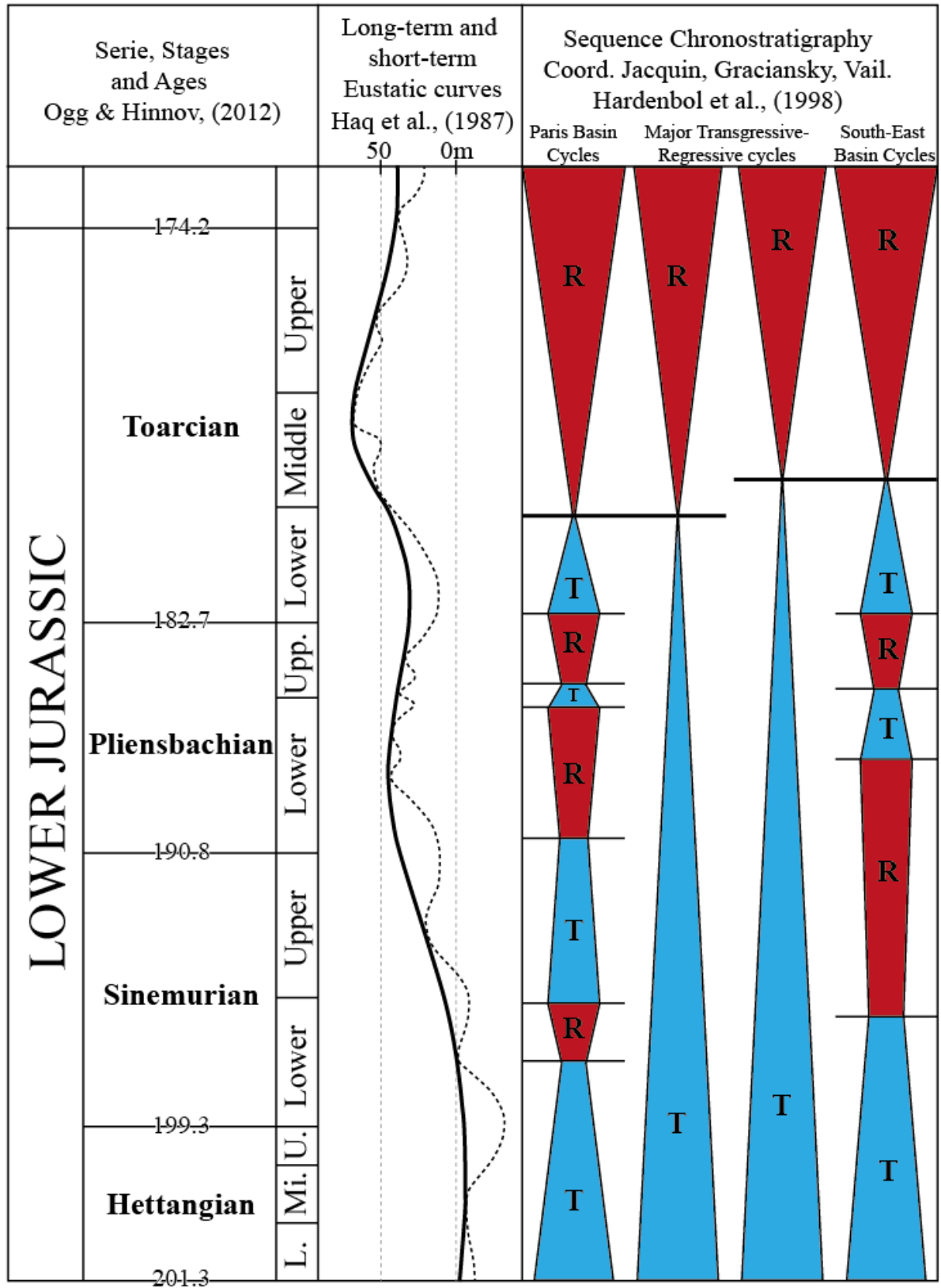


Fig. 5. Lower Jurassic sequence chronostratigraphy and eustatic variations (modified after Haq et al., 1987; Hardenbol et al., 1998; Ogg and Hinnov, 2012).

3.2 Toarcian oceanic anoxic event

The Lower Toarcian sediments of north-western Europe attain high TOC values (up to 25 wt %), in common with other organic-rich deposits observed worldwide. Based on these observations, [Jenkyns \(1988\)](#) suggested an episode of worldwide anoxic conditions named the Toarcian Anoxic Oceanic Event (T-OAE). Numerous studies have provided constraints on the timing of the T-OAE, proposing a duration of around 500 to 650 kyrs ([Jenkyns, 1988](#); [McArthur et al., 2000](#); [Bailey et al., 2003](#); [Mattioli et al., 2004a](#); [Boulila et al., 2014](#)) and a synchronous development at the European scale according to the biostratigraphy ([Mattioli et al., 2004a and 2004b](#); [Van Breugel et al., 2006](#)), except for the final stages of this event ([Baudin, 1989](#); [Jenkyns et al., 2002](#); [Mailliot et al., 2006](#); [Hesselbo et al., 2007](#)). However, the T-OAE shows a very particular context: the accumulation of organic-rich deposits occurred in epicontinental basins in Europe. Even if the T-OAE is well identified in Europe, there is a marked variability and heterogeneity of the organic matter content in sediments from one basin to another ([Baudin, 1989](#); [Baudin et al., 1990](#); [Bassoulet and Baudin, 1994](#)). Many models have led to hypotheses on the local and global factors explaining the T-OAE as well as other more localized anoxic events that may have occurred in Europe during the Early Jurassic (e.g. [Fleet et al., 1987](#)).

3.3 Biostratigraphy

Many studies establish a detailed biostratigraphic zonation with precise resolution for this time interval (e.g. [Elmi, 2005](#); [Comas-Rengifo et al., 2013](#); [Duarte et al., 2014a](#)). Hence in this study, chronozone intervals are determined according to the biostratigraphy of the International Commission on Stratigraphy and from recent studies or revisions of the biochronostratigraphy (see [Ogg and Hinnov, 2012](#)) ([Fig.4](#)).

3.4 Sedimentary deposition model

The facies distribution of the Lower Jurassic is influenced by eustatic variations and local fault activity. The shallow marine and confined depositional environments with dolomitic limestones and evaporites are replaced by carbonate ramp facies which back-step onto emerged lands. At the scale of the whole of France, the facies are mainly composed of marl-limestone alternations. In this paper, the depositional model is built from our dataset combined with field studies ([Fig. 6](#)). The subdivision of environmental settings used here is derived from [Burchette and Wright \(1992\)](#).

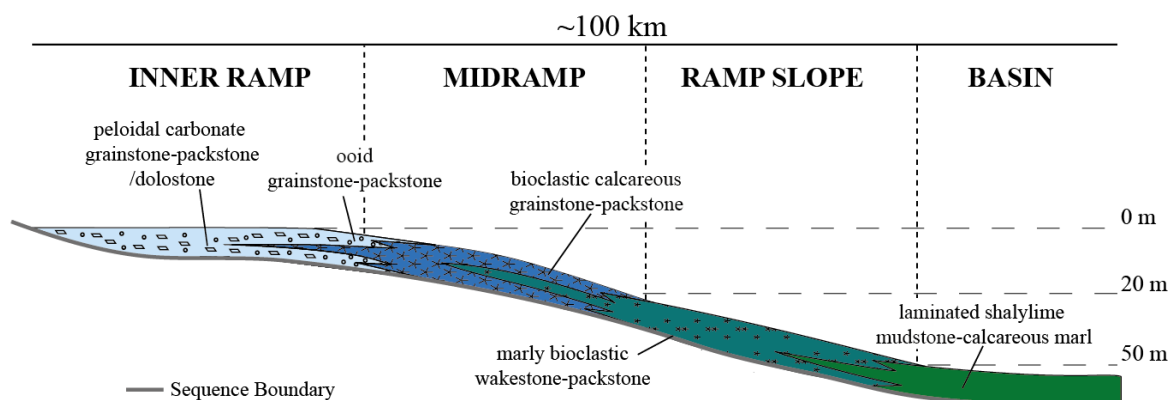


Fig. 6. Carbonate ramp settings (modified after [Burchette and Wright, 1992](#)). Inner Ramp corresponds to a very shallow environment with potentially high-energy conditions and subaerial emergence. The most representative facies are made up of coarse limestones and dolostones, which can be bioclastic or reworked by wave action. Midramp is a transitional shallow environment with bioclastic and bioturbated limestone facies. Ramp Slope and Basin are deeper environments below fair weather wave base. The marly component increases with water depth in these alternating marl-limestone facies.

3.5 Characteristics of organic-rich facies

The record of organic-rich facies is specific to each basin. The organic matter is mainly of marine type with some local influence from terrestrial inputs. In general, the organic-rich facies are attributed to episodes where marly sedimentation takes place in parallel with a substantial production of phytoplankton, in settings favourable for the development of anoxic environments. These deposits are often attributed to transgressive periods in the basins. The TOC values and mineralogical compositions within the same interval can be very variable (e.g. [Espitalié et al., 1987](#); [Hollander et al., 1991](#); [Hanzo and Espitalié, 1993](#); [Bessereau et al., 1995](#); [Disnar et al., 1996](#)). We present here a summary of our dataset (see [Table 1](#)):

In the Paris Basin, the lowermost organic-rich level (a few metres thick) in the Hettangian is located in the eastern part of the basin and is strongly influenced by terrestrial organic matter inputs with strong variations in TOC (from 0 up to 4 wt %). A thicker interval (up to 60 m) is observed within the depocentre in the Upper Sinemurian, with an average TOC of 3 wt %. The base of the Pliensbachian shows a more distinct organic-rich interval attaining a thickness of 30 m in the southern part of the basin, with a TOC of up to 4 wt %. The richest interval is located at the base of the Toarcian, in the Schistes Carton Formation that can be observed throughout the basin, reaching a thickness of 70 m with TOC values ranging from 3 to 7 wt %. In the South-East Basin, thermal maturation of the Lower Jurassic deposits has led to the expulsion of most of the organic matter present in the source rocks, and the initial TOC is difficult to determine. However, on the northern edge of the South-East Basin, in the Bresse/Jura area, the observations are similar to the eastern part of the Paris Basin. In the Causses area, whose connection with the South-East Basin developed during the Early Jurassic and which was less deeply buried, the TOC is very variable and, within the Toarcian, it can locally reach 12 wt % in certain intervals several meters thick. In the English Channel Basin, the main organic-rich interval is located in the Upper Hettangian – Lower Sinemurian, and may reach a thickness of 40 m. The TOC is very variable, with an average value of 4 wt % and pulses reaching 25 wt %. In the Aquitaine Basin, two organic-rich levels are located at the top of the Sinemurian and at the top of the Pliensbachian, showing very variable TOC (from 1 to 5

wt %) over an interval of around 10 m. Another interval is located in the Toarcian in the centre of the basin, yielding a narrower range of TOC values (from 3 to 5 wt %).

Basin, sill or area	Source Rock Age	Av TOC (wt %)	Min/max TOC (wt %)	Thickness (m)
Paris	Hettangian	2.5	1 to 4	4 to 15
Paris	Upper Sinemurian	3	2 to 6	20 to 60
Paris	Lower Pliensbachian	2	0.5 to 4	10 to 30
Paris	Lower Toarcian	5	3 to 7	20 to 70
Aquitainian	Lower Toarcian	1.2	0.5 to 2.8	?
Aquitainian	Upper Pliensbachian	1	0.5 to 2	5 to 10
South-East	Lower Toarcian	0.2*	0 to 5.5*	*
English Channel	Hettangian/Sinemurian	3	1 to 8	5 to 40
Bresse/Jura	Lower Toarcian	1.5	0.7 to 4.8	5 to 20
Causses	Lower Toarcian	2	1 to 12	2 to 10

Table 1. Source rock characteristics of the different basins. The TOC values show strong variations from one basin to another and also over time in the same basin. The Liassic succession of the Poitou sill is nowadays eroded. * In the South-East Basin, the initial TOC values are not comparable to current TOC contents because of the strong impact of burial and maturation in this area.

4. 3D Stratigraphic forward modelling

We use the DionisosFlow© 3D stratigraphic forward modelling software (Granjeon, 1996, 2009; Granjeon and Joseph, 1999; Granjeon and Wolf, 2007) to reconstruct the stratigraphic and palaeo-geographical evolution of the studied basins during the Early Jurassic. DionisosFlow© simulates the evolution of the basin geometry through time, using long-term and large-scale sediment transport equations. The results of this simulation allow us to model changes in facies distribution and sedimentation rate at the basin scale.

This stratigraphic forward modelling approach provides most of the parameters required for organic matter simulation (e.g. water depth, basin morphology, sedimentation rate). Primary productivity, carbon flux, organic matter transport, dissolved oxygen concentration (or level) and burial efficiency (which corresponds to degradation during the first few metres of burial) are introduced into the new DionisosFlow© Organic-Rich Sediment module to simulate the processes governing the distribution, accumulation and preservation of marine organic matter (Granjeon and Chauveau, 2014; Bruneau et al., 2016a). All these processes and their related parameters are based on empirical equations or observations, and a full description is available in Granjeon and Chauveau (2014).

4.1 Basin morphology construction

As already noted, the model is computed over an area of 1,000*1,000 km (Fig. 1) with square grid cells 10 km on a side. The time interval studied is 25 Myr long and the maximum thickness deposited over that duration is around 3 km (as attained in the South-East Basin). Water depth varies between 0 and 250 m over the same period. The sea covers between 60 and 80% of the

studied area during the Early Jurassic. The modelling starts at 200.9 Ma (Early Hettangian) and ends at 174.2 Ma (Late Toarcian), with a time step of 0.1 Ma (Fig. 6). The horizons dated at 200.9 Ma and 174.2 Ma represent the first and last time markers of the studied interval, respectively, and 7 additional horizons are used to constrain the modelling of basin evolution: 199.3 Ma (Hettangian-Sinemurian boundary), 195.3 Ma (Middle Sinemurian), 190.8 Ma (Sinemurian-Pliensbachian boundary), 187.6 Ma (Middle Pliensbachian), 183.5 Ma (Late Pliensbachian), 182.7 Ma (Pliensbachian-Toarcian boundary), and 176.2 Ma (Middle Toarcian). Bathymetry and thickness maps of these horizons are used to compute the accommodation space, to estimate sediment production and construct the general geometry of the study area. The nine bathymetric maps (Fig. 7) are created and extrapolated from palaeo-environmental maps and the estimated water depth of each specific facies association (Thierry, 2000; Thierry and Barrier, 2000; Enay and Mangold, 1980). The nine thickness maps (Fig. 8) are created and extrapolated from subsurface data. Using a backstripping methodology applied to bathymetric and thickness maps, these data allow us to calculate the evolution of accommodation space. In this way, we are able to perform simulations of sediment production and diffusion.

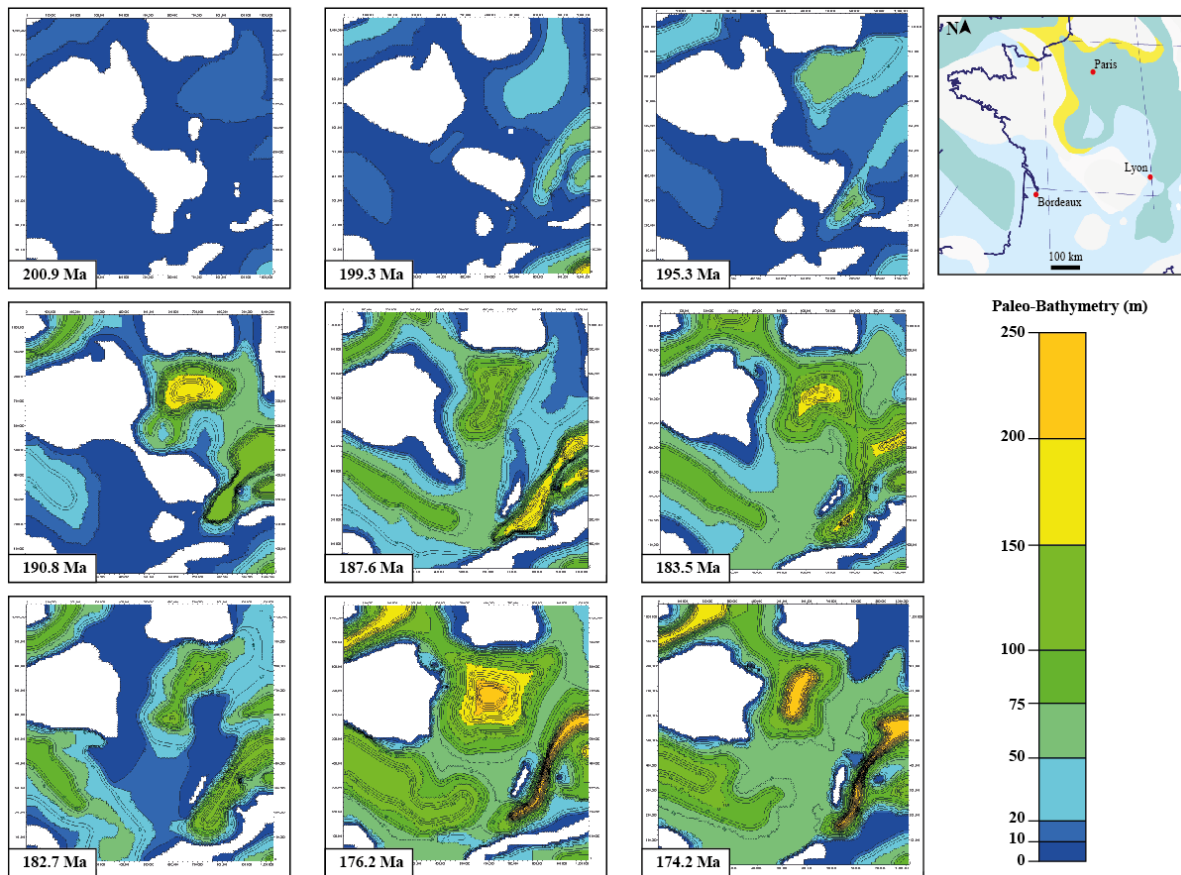


Fig. 7. Paleo-bathymetric maps of the Lower Jurassic.

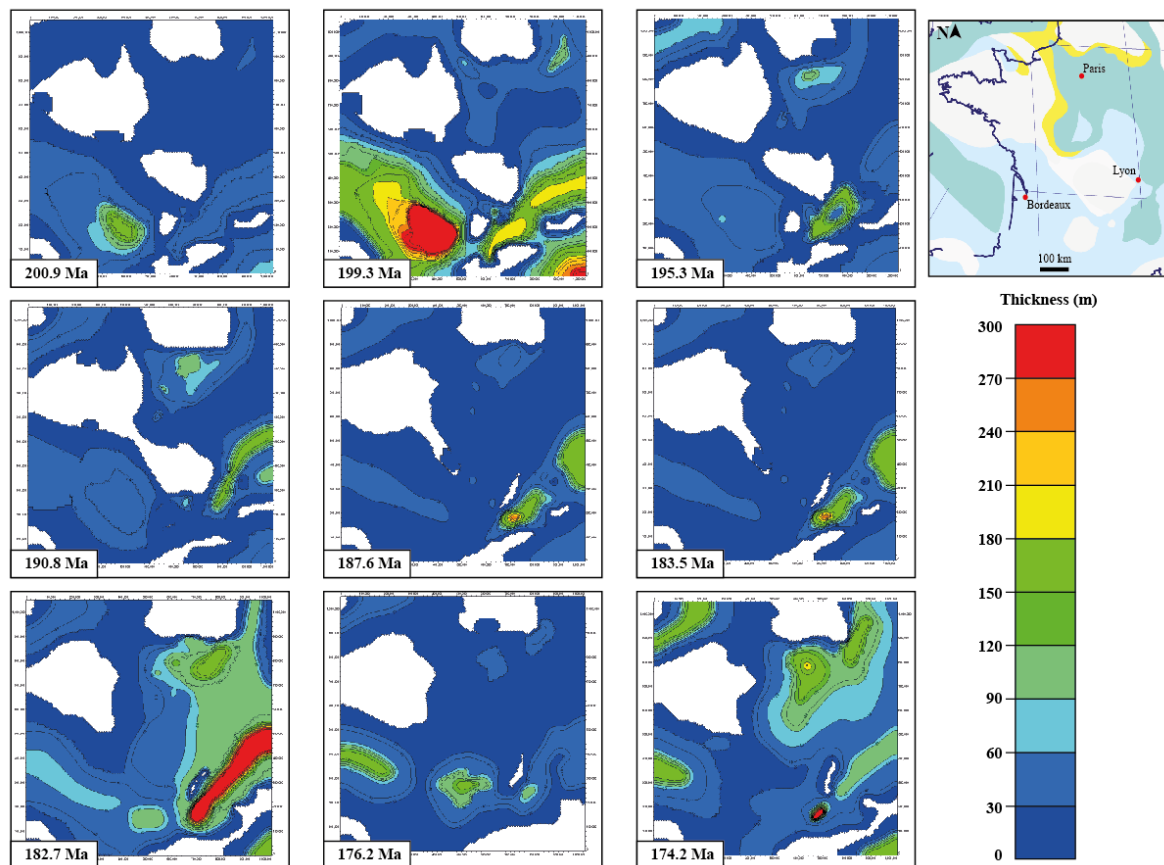


Fig. 8. Sediment thickness maps of the Lower Jurassic.

4.2 Sediment production and diffusion

The sediments simulated in DionisoFlow© models are defined as a function of production and diffusion processes. Sediments are divided into in six classes for this study:

1) Fine carbonate: associated with pelagic biogenic deposits formed by primary producers in very-low-energy environments, composed of mud-supported carbonate with wackestone to mudstone textures. This sediment can be found in the low-energy basin facies; 2) Bioclastic carbonate: associated mainly with pelagic biogenic deposits but also with bioclasts, composed of mud-supported carbonates with wackestone to packstone textures. It can be found in all the facies of the ramp but mainly in the ramp-slope facies; 3) Shallow carbonate/dolostone: associated mainly with dolomite but also oolites, bioclasts, bivalves and other producer organisms in high-energy environments, composed of grain-supported carbonates with packstone to grainstone textures mainly corresponding to the inner to mid-ramp facies; 4) Shale: associated with fine clastic components of sediments associated with low-energy conditions of the basin facies; 5) Sand: associated with medium to coarse clastic component; 6) Evaporite: associated with evaporitic deposits located in confined environments.

These sediments have different transport properties based on the coupling of slow downslope linear diffusion and fast fluvial nonlinear water-driven diffusion, which allows the simulation of sediment movement at the kilometre scale and over long time spans (e.g. Rabineau et al., 2005; Alzaga-Ruiz et al., 2009). The sediments are assumed to be composed of a given number of grain-size fractions. The mass conservation equation is applied to each grain-size fraction.

Diffusive coefficients are discriminated according to grain size (e.g. fine-grained fractions such as shale are transported more easily because of the greater degree of sediment suspension).

4.3 Best fit-model

The volume and the distribution of sediments in the basin are defined using trial and error simulations to reproduce observed thicknesses and facies. The simulated facies, which are used to compare observed facies, are defined for each cell of the model according to the percentage of each simulated sediment. The average sediment thickness error between simulation and real thickness is usually less than 10% (around 50 m on the total sediment column simulated in the Paris Basin). Both vertical and lateral simulated facies variations match with interpreted data from field studies and the literature. Only few cells show discrepancies linked to the difficulty in precisely reproducing the lateral facies changes. In such cases, cells with appropriate facies can be found within a maximum radius of 2 cells (10 km) from the calibration point.

Following the above detailed methodology, the 3D model is computed for the basins studied here based on subsurface data, field observations and measurements (Fig. 9). In detail, some local discrepancies remain concerning the modelled thickness and facies compared with the present-day situation, since changes of thickness due to post-depositional deformation are not taken into account (except for effects due to compaction). In the eastern part of the South-East Basin, the discrepancy reaches 10 % due to deformation of the Cretaceous-Cenozoic Alpine orogenic phase. Other minor differences in thickness may be due to the difficulty of assigning production values for each sedimentary facies in all the basins. In spite of this complexity, the facies and thicknesses computed from the 3D model are in agreement with all the major geological features observed in the basins.

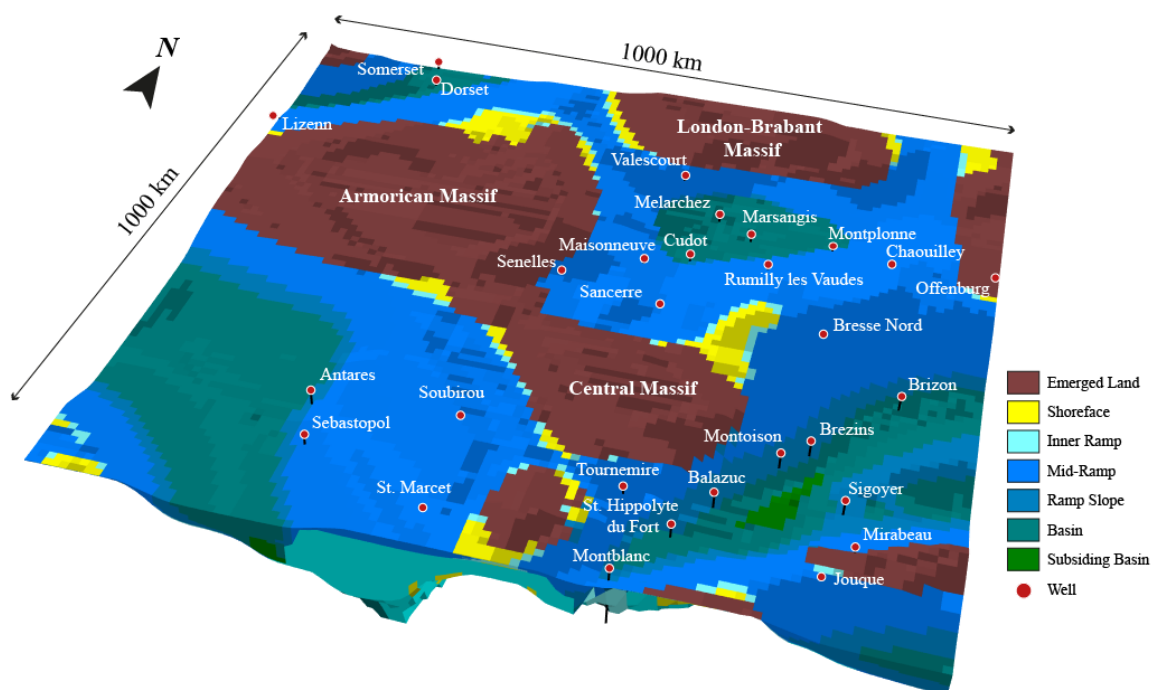


Fig. 9. 3D block of the best-fit model for the end of the Sinemurian, calibrated using facies distribution and thickness.

4.4 Organic matter modelling

Water depth, basin morphology, sedimentation rate and other parameters derived from this first calibration step are then considered as fixed for the organic matter modelling (referred to here as the best-fit model). New parameters are added to simulate all the processes needed for organic matter modelling: *primary productivity*, *carbon flux*, *organic matter transport*, *dissolved oxygen level* and *burial efficiency* (which corresponds to degradation within the topmost metre of burial). All these processes and their parameters are based on empirical equations or observations summarized in [Granjeon and Chauveau \(2014\)](#).

In our model, we define the sea-surface primary productivity near the shore ([Falkowski and Raven, 2007](#)) as remaining constant with time at a value of $400 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$, and a seaward stepwise decrease of $100 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$ is imposed every 50 km with a minimum value of $200 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$. This seaward decrease is representative of long time scales (e.g. [Berger et al., 1989](#); [Pilson, 2012](#); [Sathyendranath and Platt, 2013](#)).

The organic particles then sink to the sea-floor (e.g. [Martin et al., 1987](#); [Berger et al., 1989](#); [Honjo et al., 2008](#)). The exported production reaching the sea-floor interface is determined using the Martin equation ([Martin et al., 1987](#)) (i.e. an exponential decrease with water depth). Once the remaining organic matter reaches the sea-floor interface, its transport can be modelled using the same bedload equations of DionisosFlow© as applied to inorganic sediments (silt characteristics are used for the transport regime of the residual organic matter at the sea-floor ([Schieber et al., 2007](#))).

The calculation of dissolved oxygen level is based on the studies of [Mann and Zweigel \(2008\)](#). It is possible to differentiate local areas of low dissolved oxygen (low mixing rate and/or high primary productivity) from areas of higher redox conditions (high mixing rate and/or low primary productivity) (e.g. [Garrett, 1991](#); [Bastviken et al., 2004](#); [Jenkyns, 2010](#)). In our model, the mixing rate is constant in time and space and the dissolved oxygen level is therefore dependant only on bathymetry and primary productivity.

After sinking and transport, the amount of organic matter preserved below the topmost metres of burial (i.e. during early diagenesis) is called the burial efficiency; this parameter is controlled by the sedimentation rate ([Betts and Holland, 1991](#)) and the dissolved oxygen level on the seafloor ([Tyson, 1995](#)). The organic matter preserved from degradation is diluted depending on the sedimentation rate. The TOC obtained with this modelling approach represents the marine organic matter content after the first few metres of burial.

In the following, “simulated TOC” refers to the initial marine TOC obtained with this modelling approach, whereas “measured TOC” refers to the TOC obtained by laboratory analyses of field samples and/or derived from wireline logging after calibration ([Carpentier et al., 1991](#)). The following caveats should be taken into account when comparing the simulated TOC and measured TOC values:

- a) Inputs of terrestrial organic matter are not simulated with DionisosFlow© Organic-Rich Sediment. Comparisons must therefore be performed on the marine organic matter fraction alone while taking into account an estimation of the marine/terrestrial ratio in the measured TOC.
- b) Thermal diagenesis, maturation and expulsion of organic matter are not simulated in our model. The fraction of lost TOC related to these processes should be estimated before comparing the simulated and measured TOC. This can be easily performed with classical basin modelling tools or by data analysis (e.g. [Romero-Sarmiento et al., 2013](#)).

This approach provides the distribution and heterogeneity of organic matter through time and space. The simulated TOC represents an average value at the scale of the grid cells and time steps. The DionisosFlow© Organic-Rich Sediment approach yields simulated marine TOC

after the first metres of burial, which can then be compared against the measured TOC obtained from analyses of field samples. However, the results obtained should be considered only as relative variations, and the simulated TOC represents an average organic content which does not reflect the high-frequency variations measured on source-rocks. Nevertheless, this does not limit the relevance of the model for the identification of key factors of organic matter distribution and heterogeneity.

5. Results and Discussion

5.1 Global organic matter distribution and content

Despite constant boundary conditions in terms of primary productivity and dissolved oxygen variation, the simulated TOC shows a marked heterogeneity (from 0 to 20 wt %). Areas with high TOC content (source rock) can be simulated using internal causes alone (e.g. basin morphology, bathymetry and sedimentation rate) without involving external causes (e.g. oceanic anoxic events, upwelling). TOC maps show organic-rich areas that are relatively limited even during the Toarcian. These areas are most often located in the depocentres and less frequently in the proximal areas of the basins.

Our results cannot be compared against data from areas that are nowadays eroded or highly deformed (e.g. current rim of the Paris Basin, eastern part of the South-East Basin, Bresse-Jura and Poitou sills). However, despite the constant primary production and the absence of any variations of dissolved oxygen level linked to other factors such as primary productivity or bathymetry, the distribution of organic-rich sediments given by our model fits with available data. To highlight the reliability of the model, we present close-up views of some cross-sections and wells ([Fig. 10](#), [Fig. 11](#) and [Fig. 12](#)).

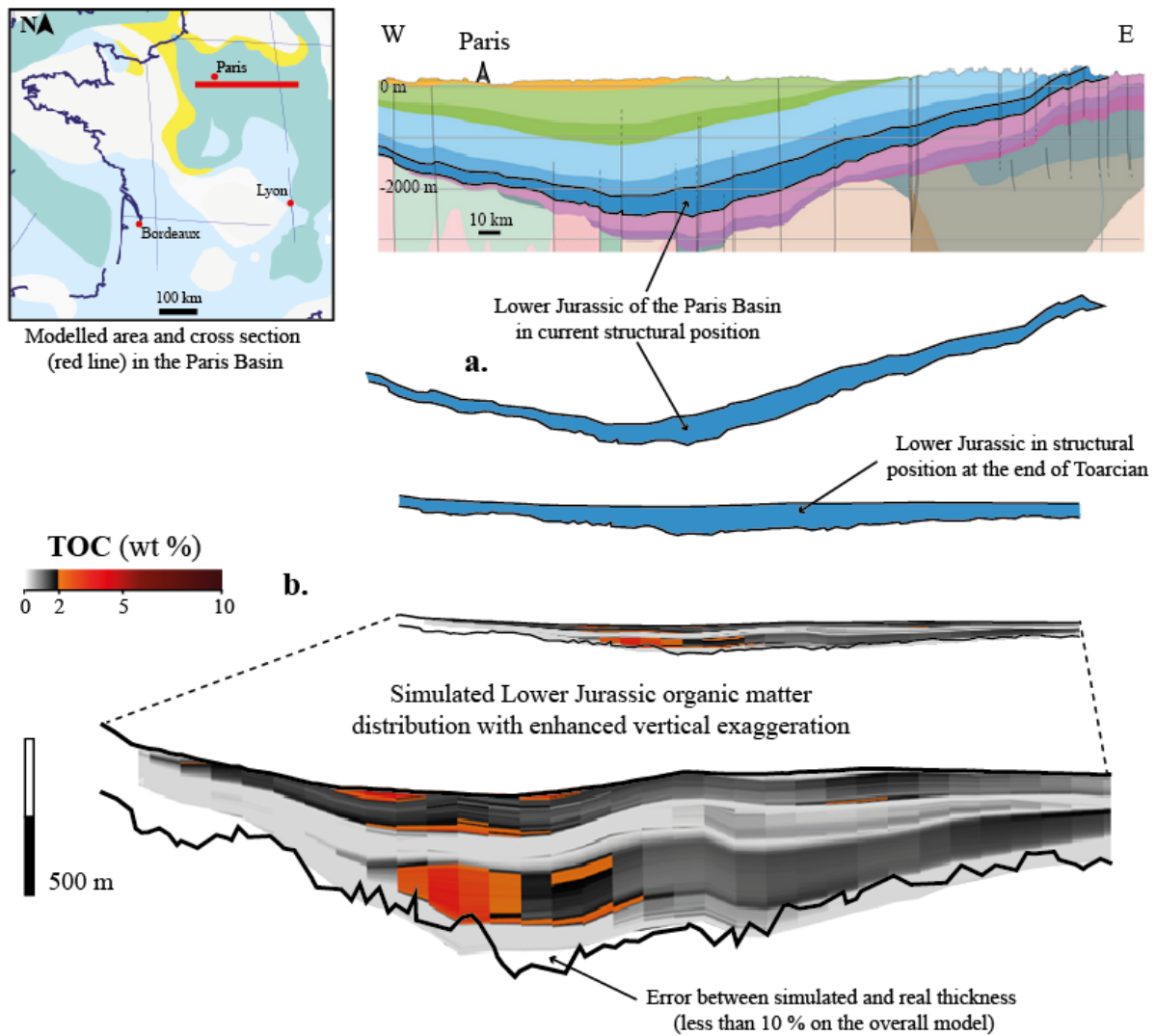


Fig. 10. a. Cross-section of the Paris Basin in current structural position and at the end of the Toarcian (modified after [Gély and Hanot, 2014](#)). b. Simulated thickness and initial TOC distribution. The simulated high initial TOC values are located in the depocentres. Thin and layers of restricted extent with high TOC can also be observed in proximal areas.

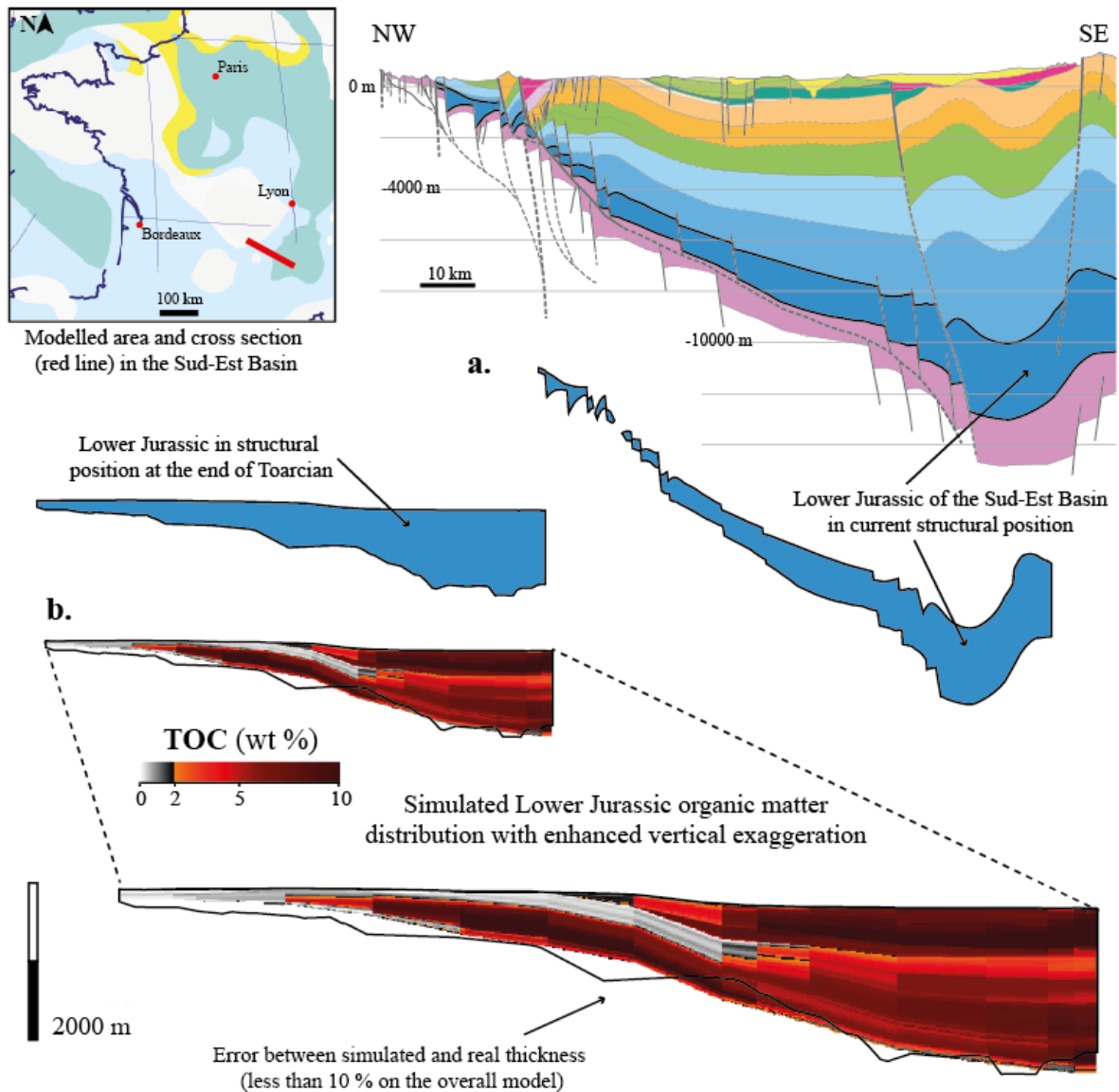


Fig. 11. a. Cross-section of the South-East Basin in current structural position and at the end of the Toarcian (modified after [Benedicto et al., 1996](#)). b. Simulated thickness and initial TOC distribution. Black line: current position of the Lower Jurassic, but abrupt changes corresponding mainly to post-depositional faults are not modelled here. The simulated initial TOC values are very high and not comparable to current TOC contents because of the strong impact of burial and maturation in this area.

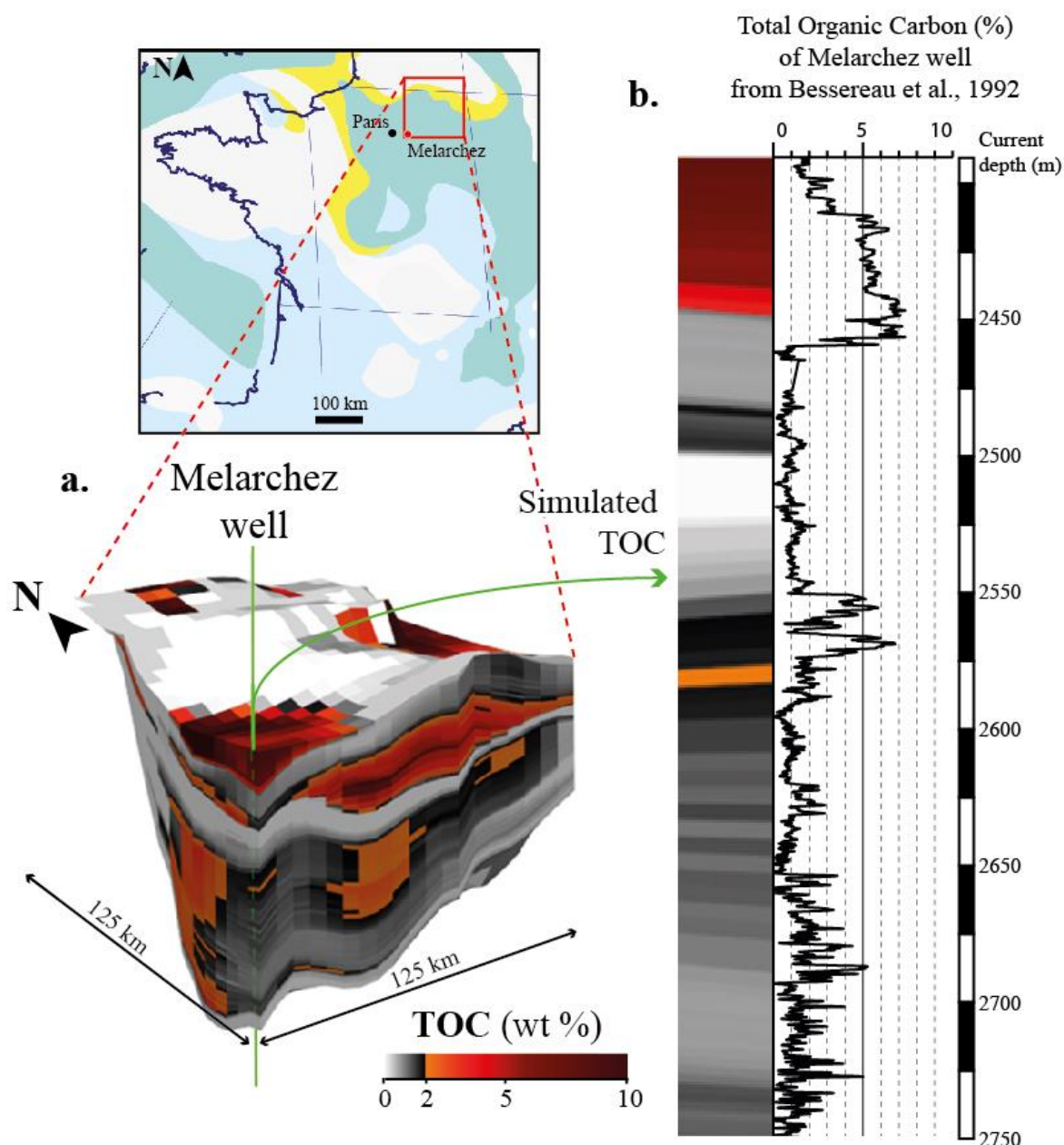


Fig. 12. *a. Simulated initial TOC distribution of the north-eastern sector of the Paris Basin at the end of the Early Toarcian. b. Comparison between simulated initial TOC and measured TOC. Discrepancies are mainly due to the input of terrestrial organic matter in the lower part of the well section, which enhances the TOC value but which is not simulated in our model.*

Nonetheless, we can note a misfit between the simulated TOC and the well data. The first difference stems from the burial effect, which is particularly evident in the Aquitaine and South-East basins where organic-rich layers can be buried under more than 10 km of Mesozoic and Cenozoic deposits (Fig. 11). In these areas, our model shows thick organic-rich layers with initial TOC reaching 20 wt % as against 5 wt % in wells. The burial and maturation history leads to expulsion of a large proportion of the organic matter, which hinders any comparison between modelling and well data. In the rest of the model, the overall trends of organic matter content in the sediments are well reproduced (Fig. 12). The 0.1-Myr time steps yield an average

TOC over intervals ranging from a few cm to more than 10 m depending on the sedimentation rate. Hence, higher frequency variations are not taken into account in our modelled TOC values, and comparisons need to be performed using the trends and average measured values of each interval (the TOC curve is derived from logging data, with a value every 0.1 to 5 m, whereas the thickness of the model grid cells, based on time steps, varies from 0 to 10 m). The duration of TOC pulses and the importance of the time scale in comparing the simulated and measured TOC remains an open question. Furthermore, to achieve an accurate fit with the TOC data, we need to consider the time-evolution of primary production and dissolved oxygen levels (e.g. Toarcian anoxic event).

5.2 Organic-rich sediment depocentres

The main organic-rich deposits are located in depocentres of the basins. This is particularly well seen in the Paris and South-East basins (Fig. 10, Fig. 11, Fig. 12 and Fig. 13). The initial TOC values are higher than 4% and can reach 6 wt % over intervals from 1 m to a tens to several tens of metres thick. These areas are mainly composed of shaly-marly to shaly facies with high sedimentation rates (around 50 to 70 m.Myr⁻¹), which are always located several hundreds of km from the coastline (from 100 to 300 km). Therefore, in our modelling, the primary productivity at the sea surface directly above these deposits is quite low and never higher than 200 gC.m⁻².yr⁻¹, since it decreases as a function of distance from the coast (Fig. 14). The depocentres also correspond to the deepest part of the basins, with water depths varying from 150 m for the Paris Basin to 400 m for the South-East Basin. Under these conditions, the dissolved oxygen level can become drastically lowered (e.g. South-East Basin) or simply depleted (e.g. Paris Basin). This oxygen depletion is due solely to bathymetry because the high primary productivity zones are too far away to have a noticeable effect on oxygen consumption. In terms of chronostratigraphy, these conditions are developed during transgressive phases, and the maximum spatial extent of these deposits is reached at the end or during the maximum flooding episode. These criteria are also satisfied during regressive phases provided there is still a significant subsidence and sediment accumulation in the deepest part of the basins.

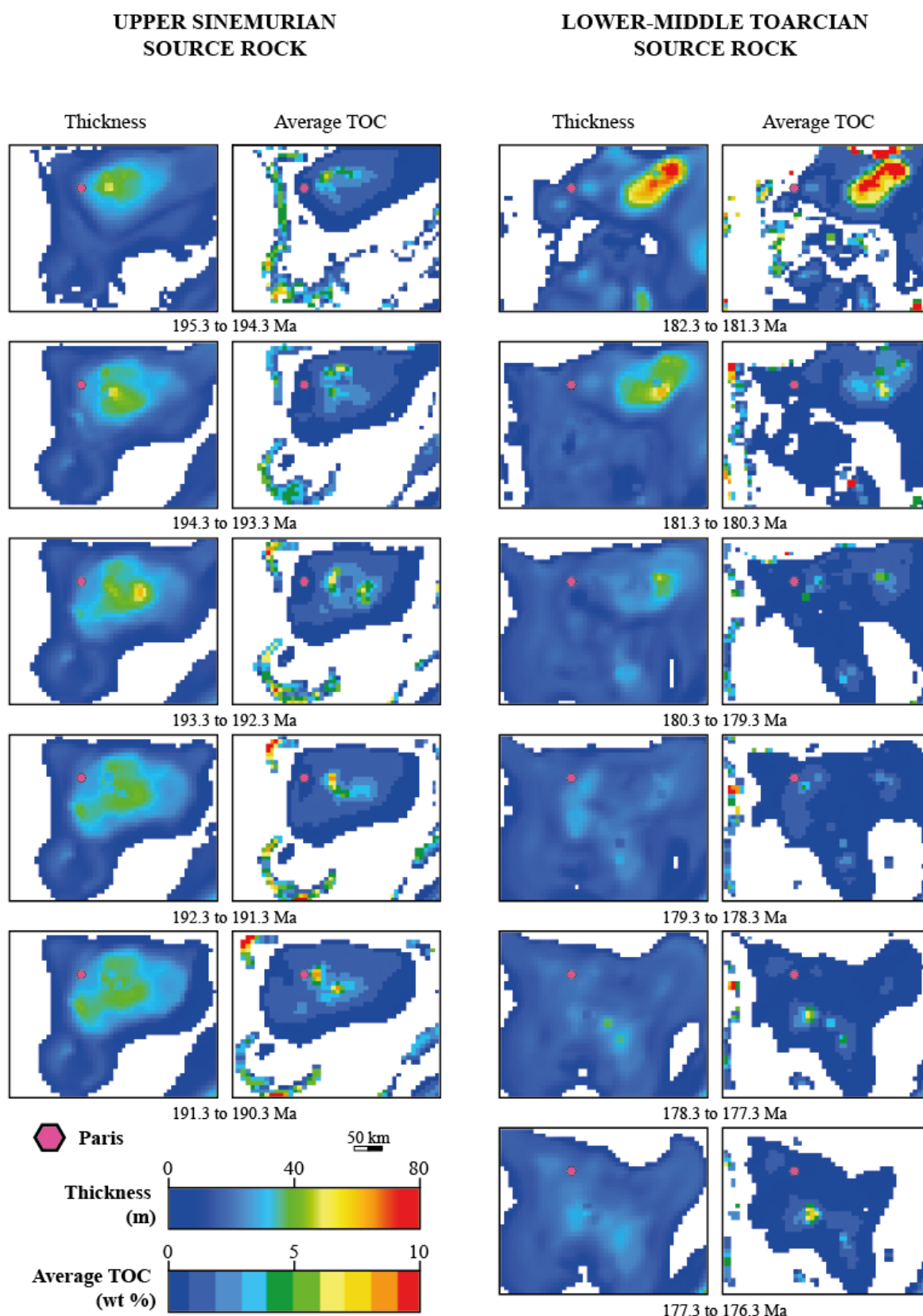


Fig. 13. Thickness and TOC distribution of Sinemurian and Toarcian source rocks in the Paris Basin. The Sinemurian organic-rich deposits are located in the same area, while the Toarcian organic-rich deposits follow the migration of the depocentres. Very thin layers with high TOC content are also found in proximal areas in the western part of the basin.

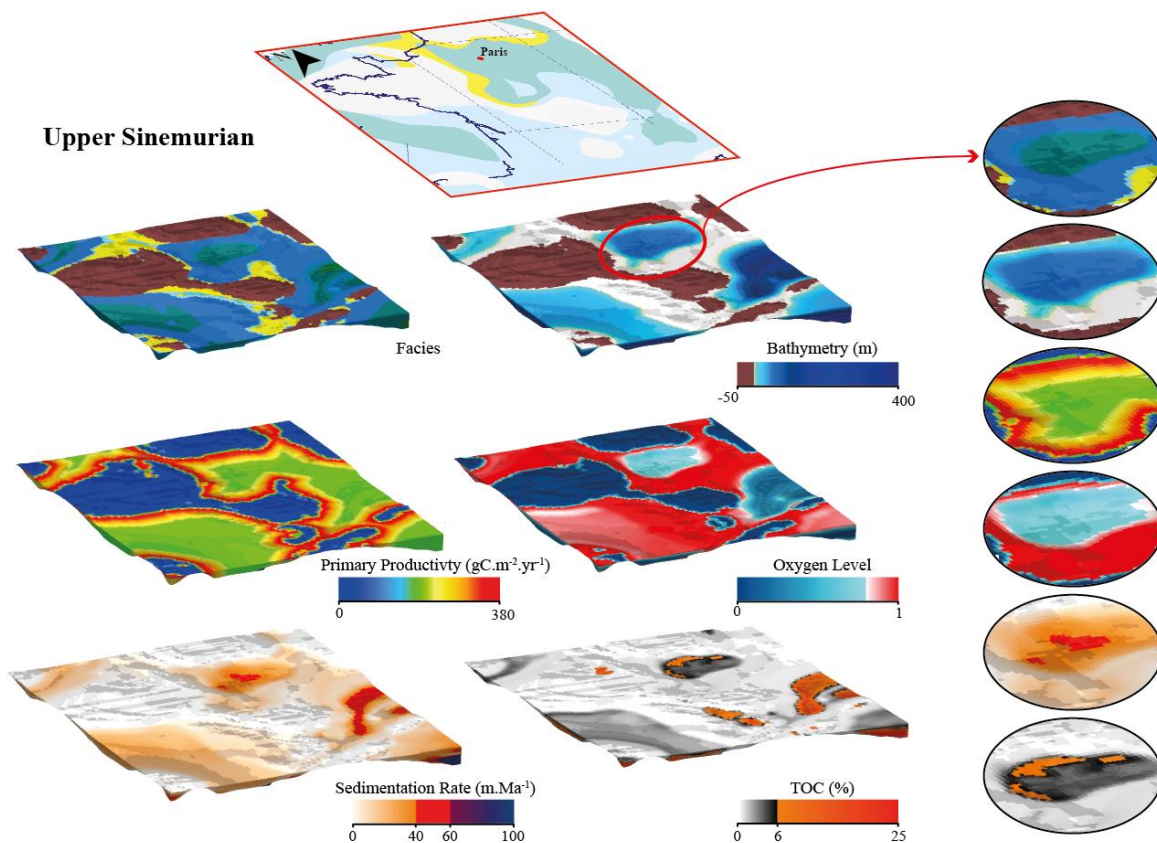


Fig. 14. Modelling results for a time slice in the Late Sinemurian. The depocentre of the Paris Basin shows high TOC. The highest TOC values are not found in the area with optimum sedimentation rate (between 40 and 60 m.My^{-1}), but in areas with lower sedimentation rate because the preservation of organic matter is already ensured by oxygen-depleted conditions: thus, in such an environment, the lower sedimentation rate results in less dilution of the TOC signal.

In view of these results, it seems that the accumulation of thick organic-rich layers is more closely related to the transport of shales in the deepest part of the basin. [Passey et al. \(2010\)](#) has described this type of distribution as a distal parasequence on the platform ramp. When the carbonate ramp attains a greater water depth, this leads to preferential accumulation of shales and organic matter. This setting is therefore more closely related to water depth than the development of a chronostratigraphic sequence. In the model results, we observe organic-rich depocentres in both regressive and transgressive phases. However, these phases have an effect on the distribution of the organic-rich deposits: their accumulation is always associated with the onset transgression (when bathymetry is sufficient to ensure gradation of carbonate ramp into basinal facies) and then spreads during the rest of the transgression as described by [Wignall \(1991\)](#) in his expanding-puddle model or in the conceptual model of [Röhl and Schmid-Röhl \(2005\)](#). But, as the carbonate ramps invade the emerged land and step backwards into the basins, the shaly and organic-rich facies also shift towards the proximal domain. According to two main scenarios, the sedimentation is a function of the slope gradient and the size of the basin (which themselves depend on sediment accumulation and subsidence): (i) if the slope gradient is steep enough, the shales and organic matter continue to be accumulated on top of the previous

depocentre and can even spread toward the proximal part (e.g. South-East basin) (Fig. 11) as described by Wignall (1991), (ii) if the slope is gentle in the deepest part, the organic matter is accumulated directly at the extremity of the carbonate ramp and a smaller proportion is transported basinwards where it is further diluted by shales (e.g. Paris Basin) (Fig. 10). This results in an organic-rich “ring” surrounding moderately rich deposits in the core of the basin (Fig. 14). Clearly, the relatively shallow epicontinental basin setting allows the development of organic-rich deposits, which might not be the case in other sedimentary basins. This phenomena also reflects the impact of sedimentation rate: in the case of the Paris Basin, under fairly well oxygenated conditions, sedimentation rates higher than 40 m.Myr^{-1} increase the preservation of organic matter due to fast burial and isolation from oxygen. However, if the sedimentation rate exceeds 60 m.Myr^{-1} , even if the preservation is increased, dilution will reduce the TOC of the sediment (Ibach, 1982; Zonneveld et al., 2010). This optimal window allows a good preservation of organic matter in areas where dissolved oxygen levels remain high. In dysoxic to anoxic environments, the preservation is already ensured and lower sedimentation rates lead to lower dilution at higher TOC (Fig. 14).

Furthermore, a migration of organic-rich sediment can be observed across the basin. This is clearly seen in the Paris Basin (Fig. 13), where the Toarcian high-TOC deposits migrate in the same direction as the depocentre, associated with good preservation conditions. In this way, while any given organic-rich horizon can be followed throughout the basin, the deposits are diachronous as already assumed in the literature (e.g. Jenkyns et al., 2002; Mailliot et al., 2006; Hesselbo et al., 2007).

5.3 Proximal areas

Other organic-rich deposits can sometimes be observed in proximal areas at distances of 10 to 30 km from the coastline. In such settings, the initial TOC values are around 3 to 6 wt % and the organic-rich layers are never more than a few meters thick, but can be followed for several km parallel to the shore. These deposits formed in shallow-water environments are composed of carbonates and/or clastics, with sedimentation rates of less 20 m.Myr^{-1} . The water depth can vary from a few to several tens of meters. Because of the proximity to the coastline, the sea-surface primary productivity in these areas is high (from 300 to $400 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$). Even if this high primary productivity leads to high consumption of oxygen, the shallow water depths allow an efficient renewal and these environments are fully oxygenated. In terms of chronostratigraphy, these depositional environments develop during transgressive phases, when the accumulation of thin organic-rich layers is favoured by the topography of the carbonate ramp. Since the proximal deposits of the ramp are relatively flat, restricted depressions can form because of differential subsidence or clastic supply. In this case, even if the level of dissolved oxygen theoretically leads to the total degradation of organic matter, the accumulation of sediments is concentrated in local depressions, especially since organic matter is transported as silt-sized particles that are abundant in high primary productivity areas. The sedimentation rate can locally reach the optimal windows described above and thus enhance the preservation of organic matter.

The same process can be observed during regressive phases on confined sills (e.g. modelled Causses and Poitou sill). Here, the proximity of emerged land leads to high primary productivity ($300 \text{ to } 400 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$) over very large areas. TOC values higher than 5 wt % can be found because of the high organic matter content of sediments deposited on this sill. Organic-rich layers can be deposited even if the environment is fully oxygenated and with sedimentation rates below the optimal windows. However, more open sills (e.g. modelled Bresse-Jura area) do not display the same feature, even in cases where primary productivity is high and sedimentation rates are more favourable for organic matter preservation. These observations

imply that, under the right conditions, an extensive sea area (at least 5,000 km²) with moderate primary productivity can lead to high TOC rather than localized areas with higher primary productivity.

6. Conclusion

This study aims to analyse the processes controlling organic matter distribution and heterogeneity through a numerical quantitative approach applied to the Lower Jurassic succession of north-western Europe. The 3D modelling approach allows us to incorporate a large amount of data and test multiple coupled processes. The simulation of organic matter sedimentation is an efficient tool for testing hypotheses of basin history, as well as predicting the source rock distribution and estimating the heterogeneity of organic matter, whereas stochastic models are based solely on extrapolation. A high primary productivity as well as factors favouring organic matter preservation could theoretically create conditions for the development of high organic carbon contents in sediments. The modelling results and associated interpretations allow us to draw several conclusions concerning the evolution of organic matter and the key factors controlling its distribution and heterogeneity:

- (1) Accumulation of thick organic-rich layers in depocentres are correlated with shaly-marly to shaly facies with high sedimentation rates (around 50 to 70 m.Myr⁻¹) as well as areas with decreased dissolved oxygen levels due to isolation and/or consumption. These settings are developed during transgressive phases, and also during regressive phases if significant subsidence and sediment accumulation continues in the deepest part of the basins.
- (2) During transgression, organic matter are accumulated in depocentres on the top of previous depocentres but can also spread toward the more proximal parts of the basin.
- (3) If the slope is gentle, an organic-rich “ring” is accumulated at the break-in-slope of the carbonate ramp, and a smaller proportion is transported basinward where it is further diluted by shales.
- (4) Organic-rich carbonate and/or coarse clastic layers a few meters thick can be followed over several kilometres parallel to the shore; these layers can be observed during transgressive phases or during regressive phases on confined sills. They are related to restricted depressions linked to differential subsidence and/or clastic supply in the proximal flat part of the ramp. In this setting, the water depth (from a few to several tens of meters) and sedimentation rates (less than 20 m.My⁻¹) hinder the preservation of organic matter but, because of the proximity of the coast line, the primary productivity at the sea surface is high.

Several different favourable conditions are highlighted for the accumulation organic-rich deposits. The main factors leading to thick organic-rich deposits are sedimentation rate (between 40 and 60 m. My⁻¹ for a good preservation) and basin geometry (depocentre position). The main factors leading to restricted and thinner organic-rich deposits in proximal settings or on sills are primary productivity and the existence of local depressions. These depositional environments for organic-rich sediments are compatible with many of the conceptual models currently proposed in the literature (e.g. [Wignall, 1991](#); [Röhl and Schmid-Röhl, 2005](#); [Passey and Bohacs 2010](#)).

This study highlights the need for a relative quantification of the palaeo-environmental conditions and processes that lead to the widespread accumulation of organic matter. For the time interval studied here, covering 25 Myr during the Early Jurassic without any major tectonic event and without assuming any variation in primary productivity or open ocean oxygen levels, the model predicts several source rocks and TOC ranging from 0 to 20 wt %.

Clearly, some of our hypotheses could be challenged and the approach used to study certain processes such as organic-matter transport could merit further investigation and improvement. Variations of primary productivity have an impact in the proximal parts of basins and in sill areas, while climatic change and other external causes may also have an influence.

ACKNOWLEDGMENTS

DionisosFlow© is developed in the framework of the IFP Energies Nouvelles project DORS (“Dionisos Organic-Rich Sediment”). We are grateful to Brigitte Doligez, Bertrand Coureaud, Jean-François Deronzier, Jean-Pierre Barde and Laurent Riquier for constructive discussions. We also thank Florence Savignac and Marie Salpin for laboratory technical assistance and BeicipFranlab for support with DionisosFlow©. Carpenter post-edited the English style and grammar.

Conclusion

Cette seconde étude a permis de définir un certain nombre de configurations où les conditions d'accumulation et de préservation de la matière organique étaient réunies. Chacune de ces configurations correspond à une association de valeurs optimums de plusieurs facteurs. L'approche numérique de cette étude a ainsi permis de quantifier l'ensemble des paramètres (e.g. taux de sédimentation, bathymétrie, niveau d'oxygénation) dans ces zones d'accumulations de matière organique, et de comparer les modèles théoriques proposés dans la littérature.

Les valeurs de TOC simulées dans le modèle sont très similaires à celles des données sans qu'aucune variation de productivité primaire ou d'oxygénation dans le temps ne soit imposée. Numériquement, la productivité primaire simulée ($400 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$ en bordure de côte avec une diminution de $100 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$ tous les 50 km avec une valeur minimum de $200 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$) permet à la fois de simuler des niveaux anoxiques et des dépôts riches en matière organiques. Ces valeurs correspondent aux analogues de plateforme carbonatée actuels ([Tyson, 2005](#)). Même si cette approche numérique permet de quantifier les gammes de valeurs des différents paramètres dans les zones d'accumulation de la matière organique et de déterminer leur position séquentielle, il reste difficile de déterminer l'influence relative de ces paramètres interdépendants.

CHAPITRE 6 – ETUDE STATISTIQUE DES PROCESSUS MODELISES

Introduction

La seconde étude a permis de déterminer l'influence de la morphologie et de l'évolution des différents bassins et seuils sur la distribution et les hétérogénéités de la matière organique. Un certain nombre de configurations où les conditions d'accumulation et de préservation de la matière organique étaient réunies a été mis en évidence. Cependant, cette approche numérique permet de définir les gammes de valeurs des différents paramètres dans les zones d'accumulation de la matière organique sans réelle quantification de leur effet relatif.

L'objectif de cette troisième étude est de déterminer l'influence relative des paramètres mis en évidence lors de la seconde étude. Dans un premier temps, cette approche a été menée par l'étude des palynofaciès du forage de Sancerre, afin de fournir une description précise de l'évolution de la matière organique au Toarcien inférieur – moyen du bassin de Paris (e.g. proportion de la matière organique marine et terrestre, TOC, IH, indices du niveau d'oxygénation). Cette étude est disponible sous la forme d'un article en préparation pour le journal **Géologie de la France** en **ANNEXES**. Dans un second temps, l'influence relative des paramètres a été quantifiée à partir d'analyses statistiques de sensibilité globale effectuées sur le modèle numérique calibré du Toarcien inférieur – moyen du bassin de Paris.

.1 Modélisation Numérique et Etude Statistique de la Distribution et des Hétérogénéités de la Matière Organique du Jurassique Inférieur du Bassin Parisien

Article 4, en préparation.

3D numerical modelling to close down the preservation versus productivity controversy.

A case study from the Toarcian of the Paris Basin.

Benjamin Bruneau ^{a,b,*}, Marc Villier ^{a,b}, Mathieu Ducros ^c, Benoit Chauveau ^c, François Baudin

^a, Isabelle Moretti ^b

^a *Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, Institut des Sciences de la Terre de Paris (ISTeP), 4 place Jussieu 75005 Paris, France*

^b *ENGIE, Paris, France*

^c *IFP Energies Nouvelles, Rueil-Malmaison, France*

* Corresponding author. UPMC Paris 06, UMR 7193, ISTeP, 75005, Paris, France. *E-mail address:* benjamin.bruneau@upmc.fr (B. Bruneau)

Abstract

The active debate about the processes governing the organic-rich sediment deposition generally involves the relative roles of elevated primary productivity and enhanced preservation related to anoxia. However, others less spotlighted factors could have a strong impact on such deposits: e.g. sedimentation rate, residence time into the water column (bathymetry), transport behaviour of organo-mineral floccules. These factors are interrelated strongly and may be obscured in the current conceptual models inspired from most representative modern analogues (i.e. upwelling zones and stratified basins). To improve our comprehension of organic matter distribution and heterogeneities, we conducted a statistical analyse on the processes involved in organic matter history which have been simulated into a 3D stratigraphic forward model using 100-kyr time steps. We have chosen the Lower-Middle Toarcian of the Paris Basin as a case study as it represents one of the better documented example of marine organic matter accumulation. The relative influence of the critical parameters (bathymetry, diffusive transport, oxygen mixing rate, PP_0 and HI_0) on the output parameters (TOC, HI, oxygen level) determined from Global Sensitivity Analyse performed in this study, shows that, in the context of shallow epicontinental basin, a moderate primary productivity ($> 175 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$) can led to local anoxia and organic matter accumulation. We argue that, regarding all the processes involved, the presence and distribution of organic-rich intervals is linked to first-order basin morphology (e.g. ramp slope, bottom topography). These interpretations are supported by very specific ranges of critical parameters which allowed to obtain output parameter values in accordance with the data. These quantitative approach and its conclusions opens new perspectives about the understanding of global distribution of organic-rich sediments.

1. Introduction

Since the 1920s, the relative effect of production versus conservation in the distribution and heterogeneities of organic matter in the sedimentary basins is under debate (Goldman, 1924; Demaison and Moore, 1980; Pederson and Calvert, 1990; Tsyon, 2005). Many studies considered that the oxygen depletion in depositional environment is the key factor for organic-rich sediments accumulation (e.g. Demaison and Moore, 1980). Other authors suggested that the organic-rich deposits are linked to a primary productivity enhancement (e.g. Küspert, 1982). The upwelling hypothesis was adopted in numerous studies (Fleet et al., 1987; Jenkyns and Clayton, 1986; Jenkyns et al., 2001). The high primary productivity in such context allows the expansion of an oxygen minimum zone and led to anoxia propagation in the basins (Jenkyns et al., 2002; Van de Shootbrugge et al., 2005a; Wignall et al., 2006; McArthur, 2007). Then, the anoxic environment would be a consequence of the high accumulation of organic matter, and not the reason of this phenomena.

This controversy can be linked to the two main modern analogues for deposition of organic-rich sediments: the upwelling areas associated to high primary productivity which led to oxygen minimum zone (oxygen consumption by organic matter consumers), and the isolated/silled stratified anoxic basins. Nonetheless, several other factors are also known to have an influence on the organic matter conservation. The transit time in water column, and consequently the time exposition to organic matter consumer organisms, is directly linked to paleo-bathymetries in modern open ocean (Martin et al., 1987). In the same way, the sedimentation rate determined the speed of organic matter isolation from oxygenated environment and the dilution rate into the sediment (Schlanger and Jenkyns, 1976).

Several theoretical models, which bring hypotheses on the local or global factors that could led to organic-rich deposits, have been proposed. These models have evolved through time by integrating progressively concepts and hypotheses from new studies (Hallam et Bradshaw, 1979; Jenkyns, 1985; Wignall, 1991; Röhl and Schmid-Röhl, 2005) (Fig. 1). More recently, numerical model which integrated empirical equations and physical laws describing the processes which determined production and conservation of marine organic matter (e.g. Martin et al., 1987; Betts and Holland, 1991; Mann and Zweigel, 2008) have been tested for Lower Jurassic western Europeans basins (Bruneau et al., 2016a, b).

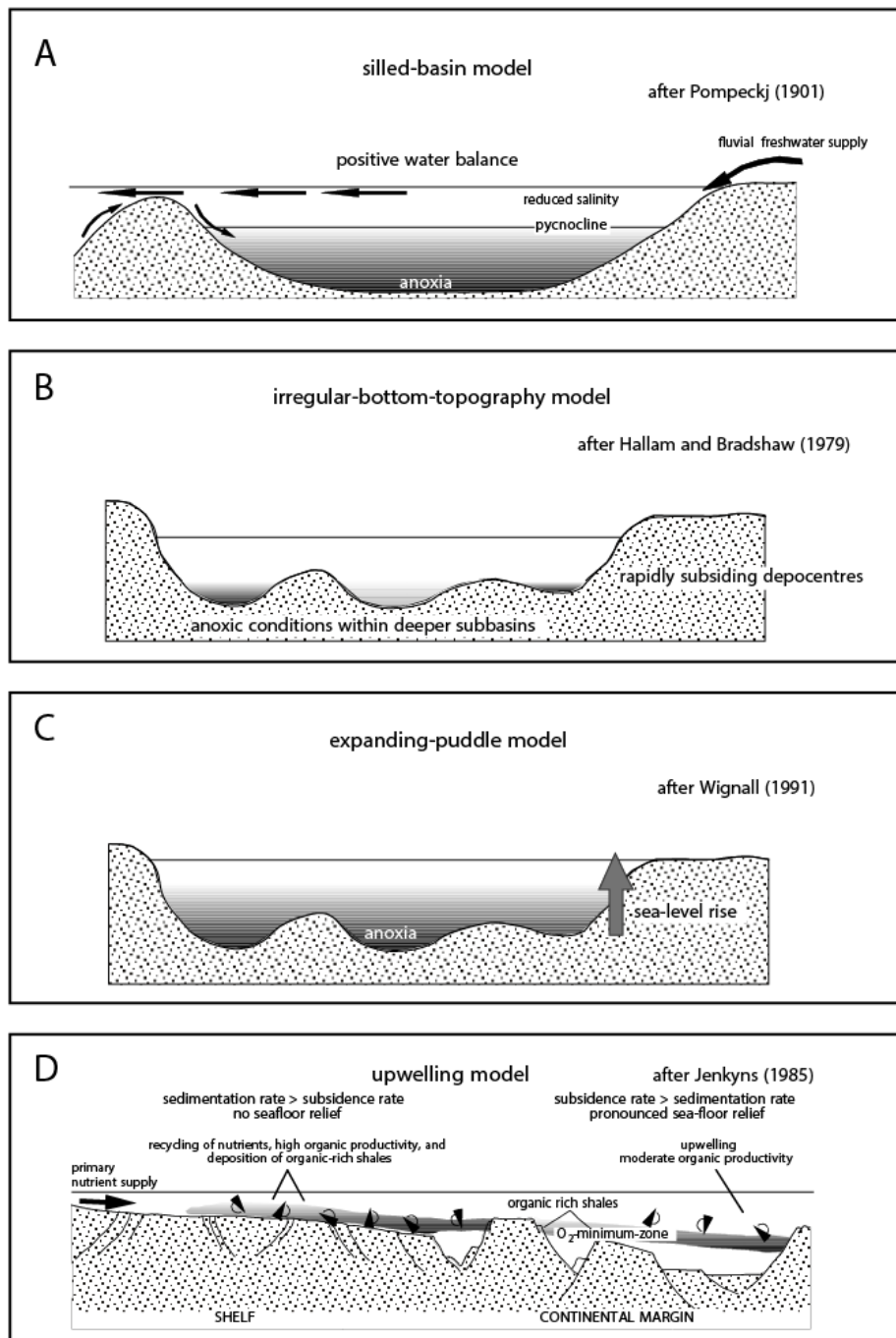


Fig. 1. Theoretical models of organic-rich deposit conditions. **A.** The silled-basin model is inspired from the Black Sea setting. The water stratification due to fresh water supply with reduced salinity allows the development of anoxia in the bottom layer (Pompeckj, 1901). **B.** In the irregular bottom stratigraphy model, the anoxia is led by low water circulation within the deep subbasins which are created by rapidly subsiding depocentres (Hallam and Bradshaw, 1979). **C.** The expanding puddle model is driven by the development of an anoxic layer in the deepest and confined part of the basin. The layer spreads during transgressive periods and allows the preservation of organic matter (Wignall, 1991). **D.** In the upwelling model, the anoxia is initiated by a high primary productivity which led to an oxygen minimum zone (Jenkyns, 1985) (figure after Röhl and Schmid-Röhl, 2005).

In this study, we focus on the Lower-Middle Toarcian of the Paris Basin. In this interval, several organic-rich layers have been deposited, especially the Schistes carton black shales. This choice was led because of the high variations of the Total Organic Carbon (TOC) which suggest different setting for the processes governing organic matter distribution and heterogeneities (Fig. 2), and because there are a lot of published studies about this interval.

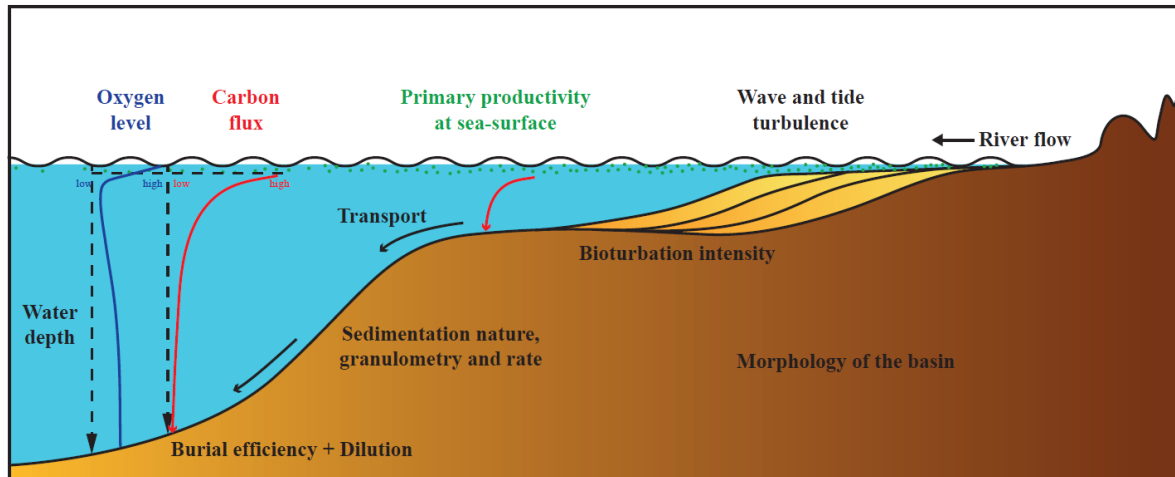


Fig. 2. Main processes affecting organic matter history, as simulated in *DionisosFlow Organic-Rich Sediment* (modified after Tyson, 1995). Primary productivity at the sea-surface is the first step in the production of organic matter and is dependent on nutrient availability, which is itself dependent on climate, upwelling, run off, vegetation cover and morphology of the catchment area. This organic matter, which is exported in the form of flocs settling from the photic zone (carbon flux), is partly consumed by other organisms in the food-chain. Once the organic remaining matter reaches the seafloor, it is eventually transported and buried. The amount of organic matter preserved after the first few metres of burial (i.e. during early diagenesis) is called burial efficiency; this parameter is mainly controlled by the sedimentation rate and local oxygen level/redox conditions. Modelling of these processes allows us to compute a theoretical initial TOC after the first few metres of burial of the marine organic matter fraction.

The goal of this study is to ascertain and quantify the contribution of the different processes which governed the organic matter history including primary productivity and oxygen level. To achieve this we used an approach in 3 steps: (1) we have first reproduced the Lower-Middle Toarcian evolution of the Paris Basin with a 3D numerical stratigraphic forward modelling calibrated on thicknesses and facies; (2) from this model, a set of 1400 meta-models, in which every processes governing organic matter history varied into a defined range, was created in order to quantify and ascertain the relative contribution of each processes; (3) this set of meta-models is used for quantitative Global Sensitivity Analyses with Sobol indices (GSA) in order to determine the influence of the critical parameters (bathymetry, diffusive transport, oxygen mixing rate, PP_0 and HI_0) on the output parameters (TOC, HI, oxygen level). Several best-fit models with an organic matter distribution corresponding to the data from well studies and obtained with different numerical processes settings, were also compared to hypotheses available in literature and discussed.

Using this new modelling-statistical analyses approach, we are able to discuss the effect of the processes that lead to heterogeneity of organic-rich deposits (Fig. 2) and the interaction between

these processes. This new modelling approach represents a step forward in our ability to make accurate prediction of both source-rock distribution and quality.

2. Geological setting

The key position of the Paris Basin (Fig. 3) during the opening of the Tethys Ocean led its structural development. The structural heterogeneities induced differential responses to the sedimentary loading and the soft extensional tectonic context led to the reactivation of some faults which localize the subsidence (e.g. Wilson et al., 1989; Kullberg et al., 2001). Although some lower order cycles are recognized (e.g. Guillocheau et al., 2000) that are often specific to each basin, two second-order cycles can nevertheless be observed in the Paris Basin (e.g. Hardenbol et al., 1998; Guillocheau et al., 2000) (Fig. 4). The first cycle corresponds to a regressive episode in the late Pliensbachian, ending at the Pliensbachian - Toarcian boundary. This episode is marked by a non-deposition in the proximal parts of the basin and limestone deposits in its distal part. The transgressive second-order cycle following this regressive episode marks the beginning of the Toarcian anoxic episode (T-OAE) (e.g. Hesselbo et al., 2007). The following maximum transgressive surface is observable throughout Europe in the lower Toarcian and marked maximum flooding of the Liassic transgression. The sedimentation became dominated by carbonates with limestone – marl alternations. A further regressive phase recorded by oolitic deposits across Europe marks the end of the Early Jurassic.

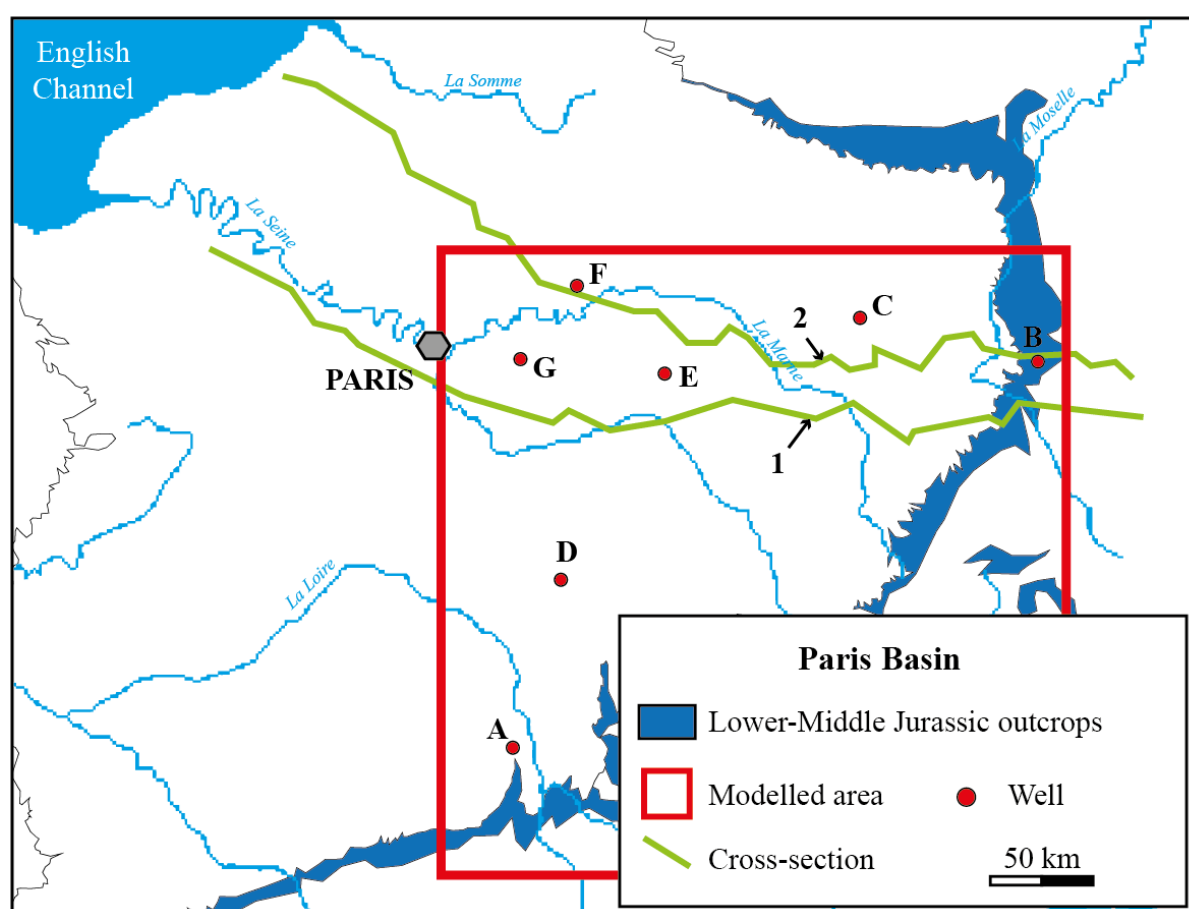


Fig. 3. Study area and localization of the 2 cross-sections and the 7 wells used for the calibration of the stratigraphic model (red square) (modified after Delmas et al., 2002).

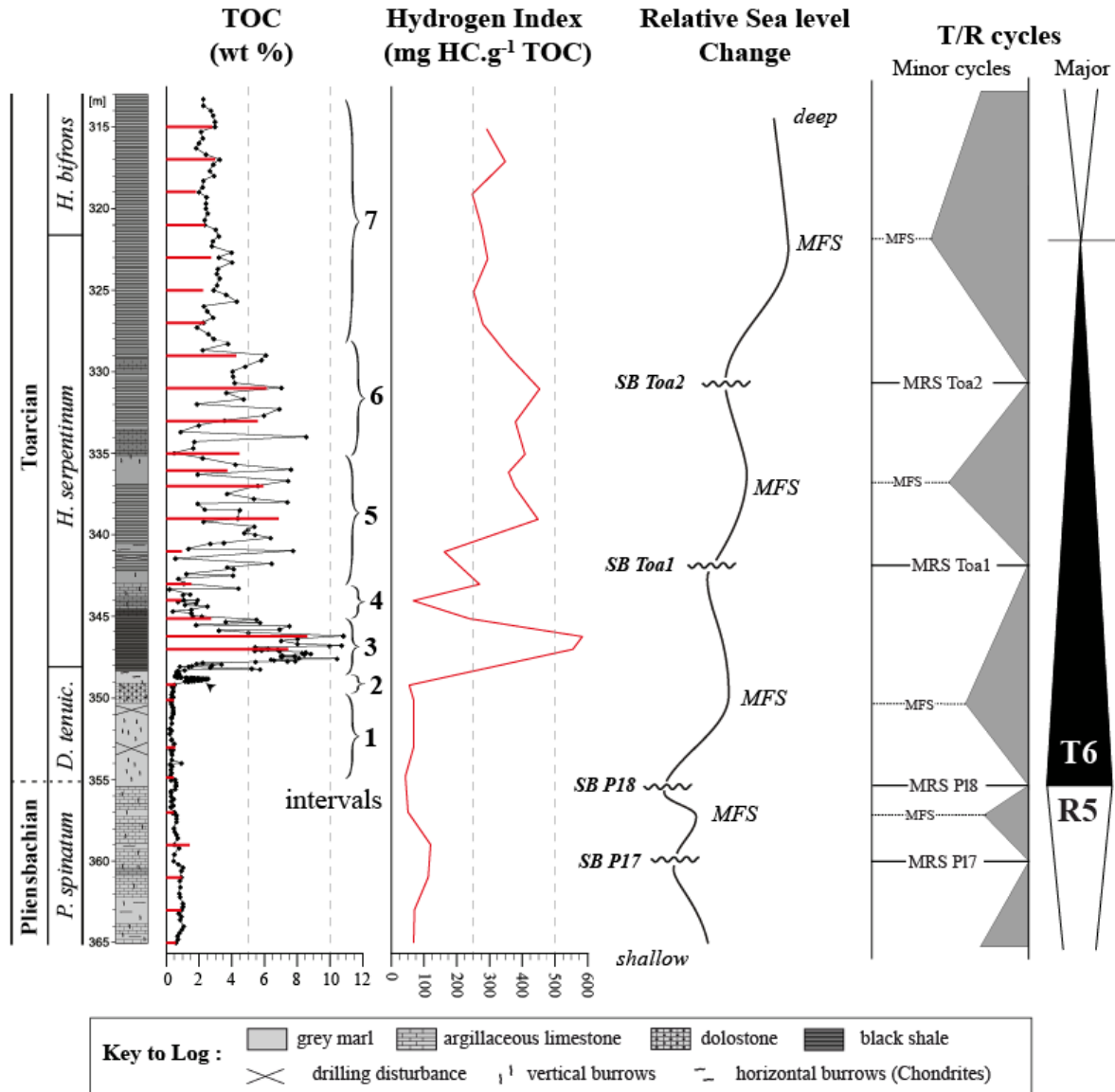


Fig. 4. Vertical distribution of TOC and IH of the Lower-Middle Toarcian interval in the Couy-Sancerre core. The red data are from this study (modified after Hermoso and Pellenard, 2014). The interval division according to the organic content of the Couy-Sancerre core is after Bruneau et al. (2016c).

3. Dataset

The study area covers 300*300 km zone extending over the proximal and distal part of the Paris Basin (Fig. 3) and the studied time interval emphasises on the Lower-Middle Toarcian from the base of *Tenuicostatum* biozone (182.6 Ma) to Bifrons biozone (179.7 Ma) (Fig. 4). The calibration of the numerical stratigraphic model was based on data from literature, 2 cross-sections (Fig. 5) and 7 wells (Fig. 6), including structural setting, biostratigraphy, sedimentary characterization and mineralogical/geochemical analyses (wireline logging, carbologs, and more than 300 Rock-Eval analyses).

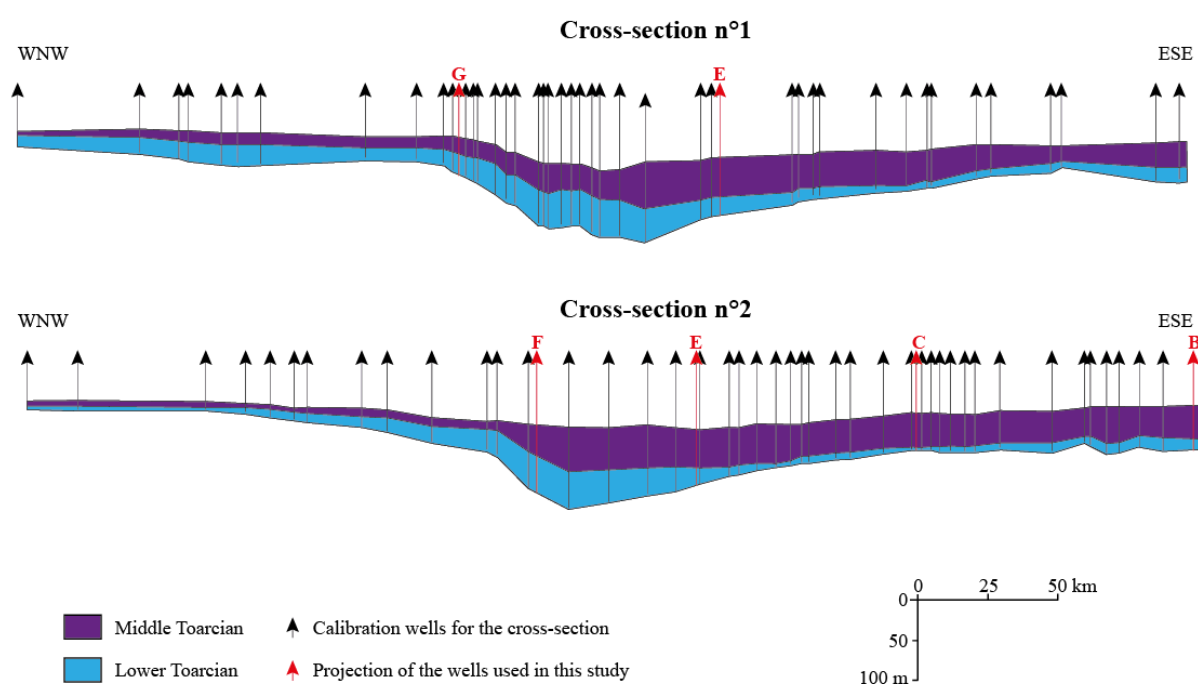


Fig. 5. Lower-Middle Toarcian cross-sections of the Paris Basin (from Delmas et al., 2002).

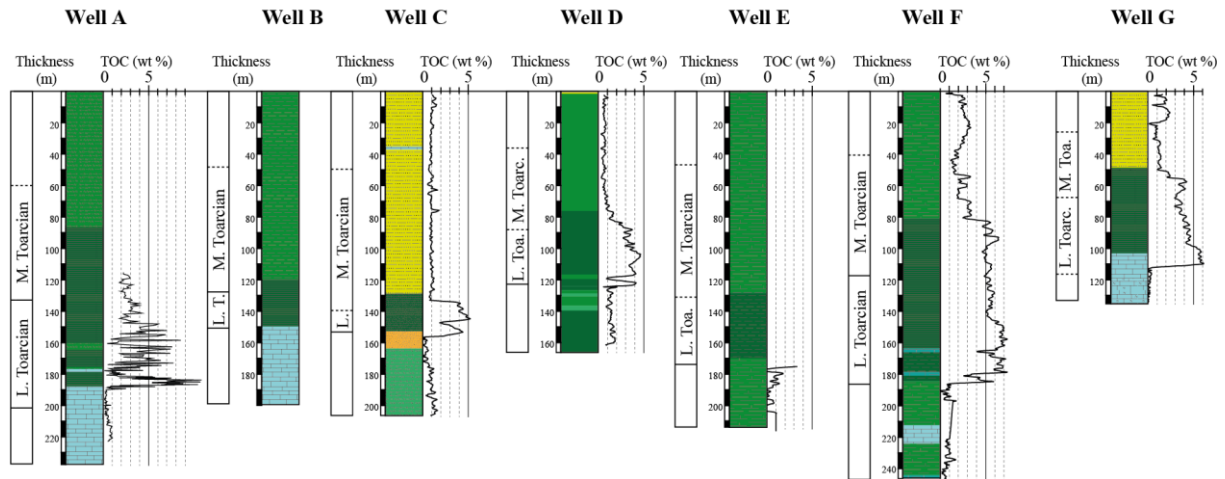


Fig. 6. Lithostratigraphic logs and TOC of the 7 wells used for the calibration of the stratigraphic model.

4. 3D Stratigraphic forward modelling

We used the DionisosFlow© 3D stratigraphic forward modelling software (Granjeon, 1996, 2009; Granjeon and Joseph, 1999; Granjeon and Wolf, 2007) to reconstruct the stratigraphic and palaeo-geographical evolution of the Lower-Middle Toarcian of the Paris Basins. DionisosFlow© simulates the evolution of the basin geometry through time, using long-term and large scale sediment transport equations. Its results include facies repartition and sedimentation rate evolution at the basin scale.

The volume and the distribution of sediments in the basin are defined with trial and error simulations in order to reproduce observed thicknesses and facies exposed along the selected calibration wells. The simulated facies, which are used to compare observed facies, are defined for each cell of the model according to percentage of each simulated sediment.

Following the above detailed methodology, the 3D model was computed with 5*5 km cells and 0.1 Ma time step for the selected Paris Basin zone (Fig. 3) and based on subsurface and field data observations and measurements. In details, some local minor discrepancies remain for the thickness which may be due to the difficulty to set production and supply for each sediment. In spite of this complexity, the facies and thicknesses computed from the 3D model sustain all the major geological features observed in the basin (Fig. 7). The average sediment thickness error between simulation and real thickness is usually less than 10% (around 15 m on the total sediment column simulated). Both vertical and lateral simulated facies variations match with interpreted data from field study and literature.

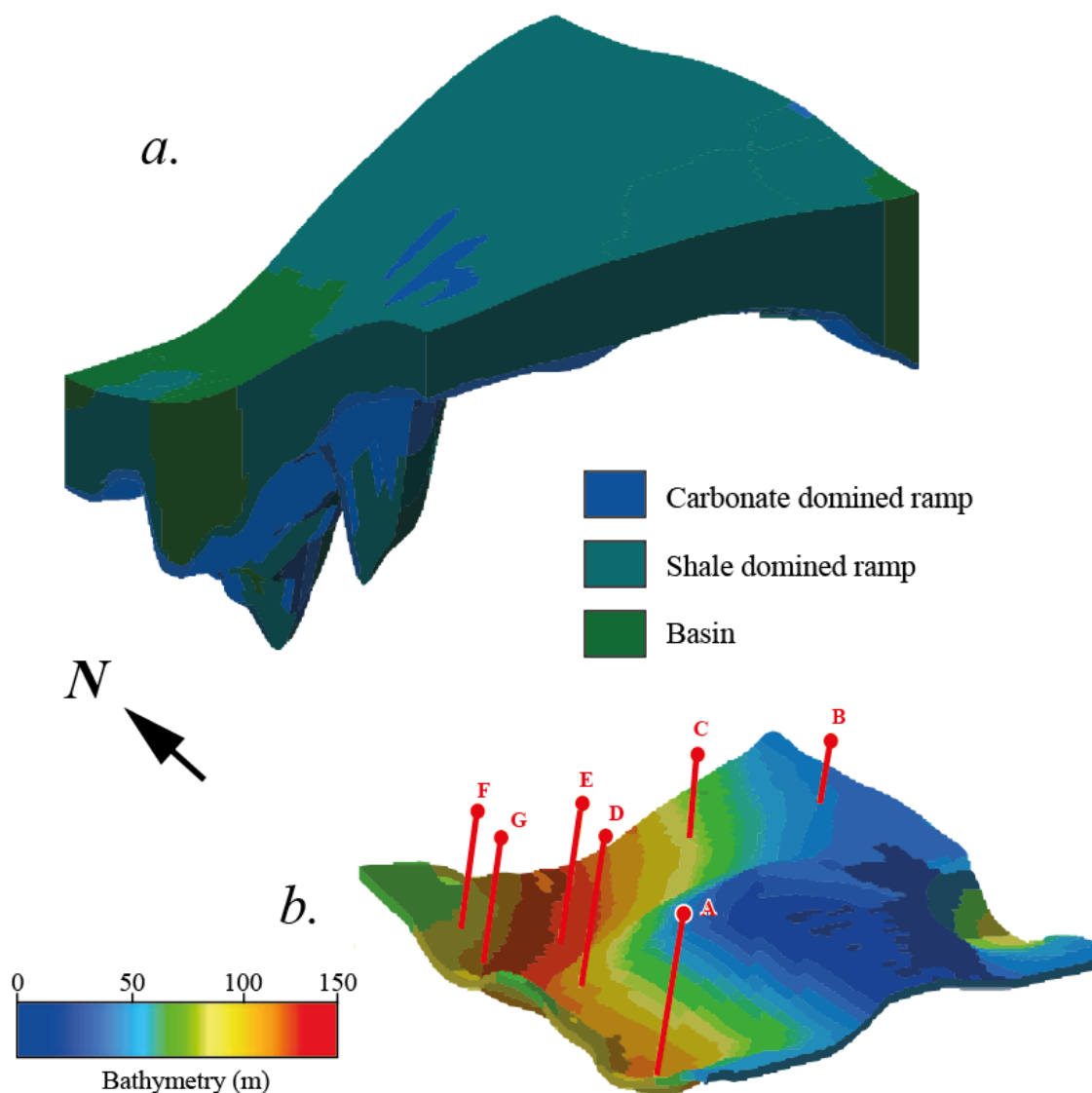


Fig. 7. a. 3D block with the facies distribution for Lower-Middle Toarcian for the modelled area. b. Bathymetry map and its 3D projection at 182.3 Ma (vertical exaggeration = 700). The deepest part of the basin developed around the current Morvan region which is characterized by a shallow water area.

5. Organic matter modelling

This stratigraphic forward modelling approach provides most of the needed parameters for organic matter simulation (e.g. water depth, morphology of the basin, sedimentation rate). Additional parameters were introduced with the new DionisosFlow© Organic-Rich Sediment modelling module (Granjeon and Chauveau, 2014; Bruneau et al., 2016a, b) in order to simulate all the processes related to organic matter sedimentation (Fig. 2): *primary productivity*, *carbon flux*, *organic matter transport*, *dissolved oxygen level*, *burial efficiency* (which corresponds to degradation during the first meter of burial) and *initial Hydrogen Index (HI_0)*. All these processes and their parameters are based on empirical equations or observations which are summarized in Granjeon and Chauveau (2014).

In our model the primary productivity is defined with a value at sea surface (Falkowski and Raven, 2007) with a seaward stepwise decrease representative of large time scale (e.g. Berger et al., 1989; Pilson, 2012; Sathyendranath and Platt, 2013).

Then, the determination of the exported production, the fraction which reaches the sea floor interface, is deduced following the Martin law (Martin et al., 1987) that respects an exponential decrease with water depth.

Once the remaining organic matter reaches the sea-floor interface, it can be transported by bottom currents. This transport is modelled using the same bedload equations of DionisosFlow© than for the inorganic sedimentary particles. Clay to sand characteristics are used for the transport regime of the residual organic matter at the sea-floor (Schieber et al., 2007).

The dissolved oxygen level calculation is based on works of Mann and Zweigel (2008). It is possible to differentiate local areas of low dissolved oxygen zones (low mixing rate and/or high primary productivity) and areas of high oxygenation conditions (high mixing rate and/or low primary productivity) (e.g. Garrett, 1991; Bastviken et al., 2004; Jenkyns, 2010) which depend on bathymetry, primary productivity and oxygen mixing rate. The oxygen level is expressed by a non-dimensional value ranging from 0.3 (anoxic environment) to 1 (fully oxygenated environment).

After sinking and transport, the amount of organic matter preservation below the first meters of burial (i.e. early diagenesis), called burial efficiency, is controlled by the sedimentation rate (Betts and Holland, 1991) and the dissolved oxygen level on the seafloor (Tyson, 1995). The organic matter preserved from degradation is diluted depending on the sedimentation rate. The TOC obtained with this modelling approach represents marine organic matter content after the first meters of burial. Its Hydrogen Index (HI) is calculated from HI_0 and the burial efficiency. In the rest of this paper, the “simulated TOC” refers to this initial marine TOC obtained with this modelling approach, and the “measured TOC” refers to the TOC obtained by laboratory analyses of field samples and/or deduced from the wireline logging after calibration (Carpentier et al., 1991). Comparison of this simulated TOC with measured TOC requires the following cautions: the terrestrial organic matter supply is presently not taken into account in the DionisosFlow© Organic-Rich Sediment module. Comparison are therefore be done on the marine organic matter fraction alone taken into account an estimation of the marine/terrestrial ratio of measured TOC provided by Bruneau et al. (2016c).

This approach provides both organic matter distribution and heterogeneity through time and space. The simulated TOC represents an average value at the scale of the cells and of the time steps. The comparisons between simulated marine TOC after the first meters of burial obtained with the DionisosFlow© Organic-Rich Sediment approach and the measured TOC obtained from laboratory analyses of field data should be considered as relative variation comparisons. The average TOC values of organic-rich intervals are simulated rather than high frequency variations measured, but it does not limit the significance of the model for the identification of key factors of organic matter distribution and heterogeneity.

6. Statistical analyses

To provide statistical analyses of the processes governing organic matter distribution and heterogeneities we use the CougarFlow© software. It allows to create meta-models from the stratigraphic model described in the above section 4 (3D Stratigraphic forward modelling). These meta-models are the same than the stratigraphic model calibrated on thickness and facies distribution, but they integrated variations on the organic matter modelling parameters described in the section 5. Organic matter modelling. The range of these variations is determined from values available in literature and summarize in [Table 1](#). The sedimentation rate has an impact on organic matter history but it was fixed in this approach in order to not modify the calibration of the stratigraphic model. As the sedimentation rate, variation on bathymetry can bring a loss of calibration; only low variations which allowed to keep the calibration where introduced in the meta-models.

Parameter	Variation (Min)	Variation (Max)
Bathymetry	-20 m	20 m
Diffusive transport	0.05 km ² .kyrs ⁻¹	0.5 km ² .kyrs ⁻¹
Oxygen mixing rate	0.3	1
PP ₀	100 gC.m ⁻² .yr ⁻¹	400 gC.m ⁻² .yr ⁻¹
HI ₀	500 mg.gC ⁻¹	700 mg.gC ⁻¹

Table 1. Range of variations of critical parameters introduced in the meta-models. Bathymetry: the variations are low in order to not modify the calibration of the initial stratigraphic model. Diffusive transport: it ranges from sand (0.5 km².kyrs⁻¹) to clay (0.05 km².kyrs⁻¹) particle behaviour in order to simulate organo-mineral agglomerates ([Schieber et al., 2007](#)). Oxygen mixing rate: the variations (formulated by values without dimension) vary from a confined environment (0.3) to an open and agitated environment (1). PP₀: it defined the primary productivity (in gC.m⁻².an⁻¹) at the cells which are closest to the coast, this values decrease with a seaward decrease of 5 % of the initial value evry 10 km. HI₀: it defined the initial Hydrogen Index of the organic matter.

The variations on these critical parameters in the meta-models have an effect on 5 output parameters: (1) the thickness and (2) the facies distribution, which are used as control parameters to determine if the model is still calibrated; (3) the oxygen level which determines the available oxygen for organic matter degradation; (4) the TOC which is dependent on the amount of organic matter and on it conservation (primary productivity + oxygen level); (5) the HI which is dependent on the HI₀ and the conservation of organic matter.

In order to investigate the relative influence of these parameters we divided the stratigraphic forward model into 7 intervals according to their organic content behaviour as defined by [Bruneau et al. \(2016c\)](#) ([Fig. 4](#)). The statistical analyses were conducted on a set of 200 meta-models for each interval (for a total of 1400 models for the whole Lower-Middle Toarcian).

The construction of these meta-models was done using the following mathematical concepts: We considered an interest property $y(t, u, \theta)$ which is dependent on the time t and/or on the spatial position u (here, this property is one of the 5 critical parameters: bathymetry, diffusive transport, oxygen mixing rate, PP₀ and HI₀), and a set of uncertain parameters θ (which

corresponds to all the parameters of the model). For the rest of the description, we considered that y is only dependant on u (but the methodology is the same for the time t). It involved the characterisation of $y(t, u, \theta)$ by its most important components using a Karhunen-Loève decomposition:

$$y(t, u, \theta) = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k(\theta) \phi_k(u)$$

$\phi_k(u)$ are the base functions and $\alpha_k(\theta)$ are the projection coefficients on this base. In this decomposition, we can see that the uncertain parameters are separated from the spatial component. The base functions are orthogonal and sort by descending order of explained variance of the response. So, this decomposition is equivalent to define new variables α_k which are here decorrelated. These components will be approach by Gaussian processes meta-models.

In practice, the analytical form of the response is unknown. We suppose that we have generated an experimental plan $(\theta_i)_{i=1..n}$ for the uncertain parameters, and simulated the corresponding interest responses $(y(u, \theta_i))_{i=1..n}$ into each cell of the model. Then, we use this sample for the Karhunen-Loève decomposition of the output, which correspond in this case to make a principal component analysis (PCA). For every element of the sample, we have:

$$y(u, \theta_i) = \sum_{k=1}^M \hat{\alpha}_k(\theta_i) \hat{\phi}_k(u)$$

where $\hat{\phi}_k(u)$ are the estimated base functions which correspond to the principal components of the PCA. The linear decomposition is finite, with $M \leq N$ terms. In the case where the size of the sample n is lower than the cell number, $M = n$. In practice, this decomposition can be “compressed” by keeping only a limited number of base functions which capture the essence of the response variance:

$$y(u, \theta_i) \approx \sum_{k=1}^m \hat{\alpha}_k(\theta_i) \hat{\phi}_k(u)$$

m is chosen just right so that the resulting linear combination corresponds to a given percentage of the total variance of the sample response. Here we try to reproduce 95% of the variance. In this case, the meta-model does not interpolate the sample values.

Eventually, the construction of the response surfaces for the map output used here went through the following workflow:

- 1- Simulation of the interest property for a given experience plan
- 2- PCA of the interest property on this learning set
- 3- Truncation of the base to only kept the m base functions which allow to explain 95% of the total variance.
- 4- Construction of a meta-model for each function $\hat{\alpha}_k(\theta), k = 1..m$ from the sample values $(\theta_i, \hat{\alpha}_k(\theta_i))_{i=1..n}$ (Gaussian processes).

The meta-model y^* of the interest output is then written, for every values of the parameters θ :

$$y^*(u, \theta) = \sum_{k=1}^m \hat{\alpha}_k(\theta) \hat{\phi}_k(u)$$

In the case where the interest property $y(t, \theta)$ does not depend on the space but only on the time, the decomposition is done by the same approach. The simulated values at a given set of times replaced the simulated values on the cells. For now, the carried tests do not take into account a coupled dependency in time and space. The validation of the obtained meta-models was provided by a leave-one-out cross-validation (Q2).

7. Results and discussion

7.1. Global sensitivity analyse

The set of 200 meta-models for each interval provided a predictive coverage including all the possible variations of the parameters of the Table 1. The output maps of TOC ranged from very low to very high values (Fig. 8). The predictive meta-models are used for quantitative Global Sensitivity Analyses with Sobol indices (GSA) in order to determine the influence of the critical parameters (bathymetry, diffusive transport, oxygen mixing rate, PP_0 and HI_0) on the output parameters (TOC, HI, oxygen level). As the basin morphology and sedimentation rates are roughly the same throughout the Lower-Middle Toarcian time interval, the results are very similar from an interval to another. The impact of critical parameters on output parameters are equivalent through the specific case of the Lower-Middle Toarcian of the Paris Basin. The results of the interval 3 (182.3 to 182.1 Ma) which is the interval with the highest TOC content are presented here (Fig. 4).

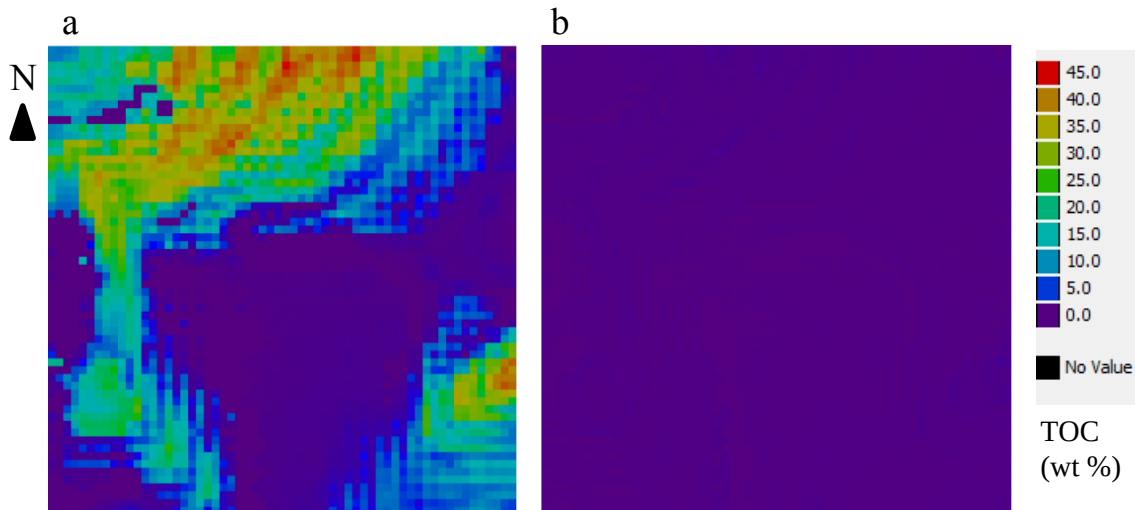


Fig. 8. Examples of maximum values (a.) and minimum values (b.) for TOC maps provided by the meta-models for the Ma interval 3 (182.3 to 182.1).

The result maps of GSA are presented Fig. 9 (total effect maps). The total effect maps provided the quantitative influence of each variable parameter on the output parameters (TOC, HI, oxygen level).

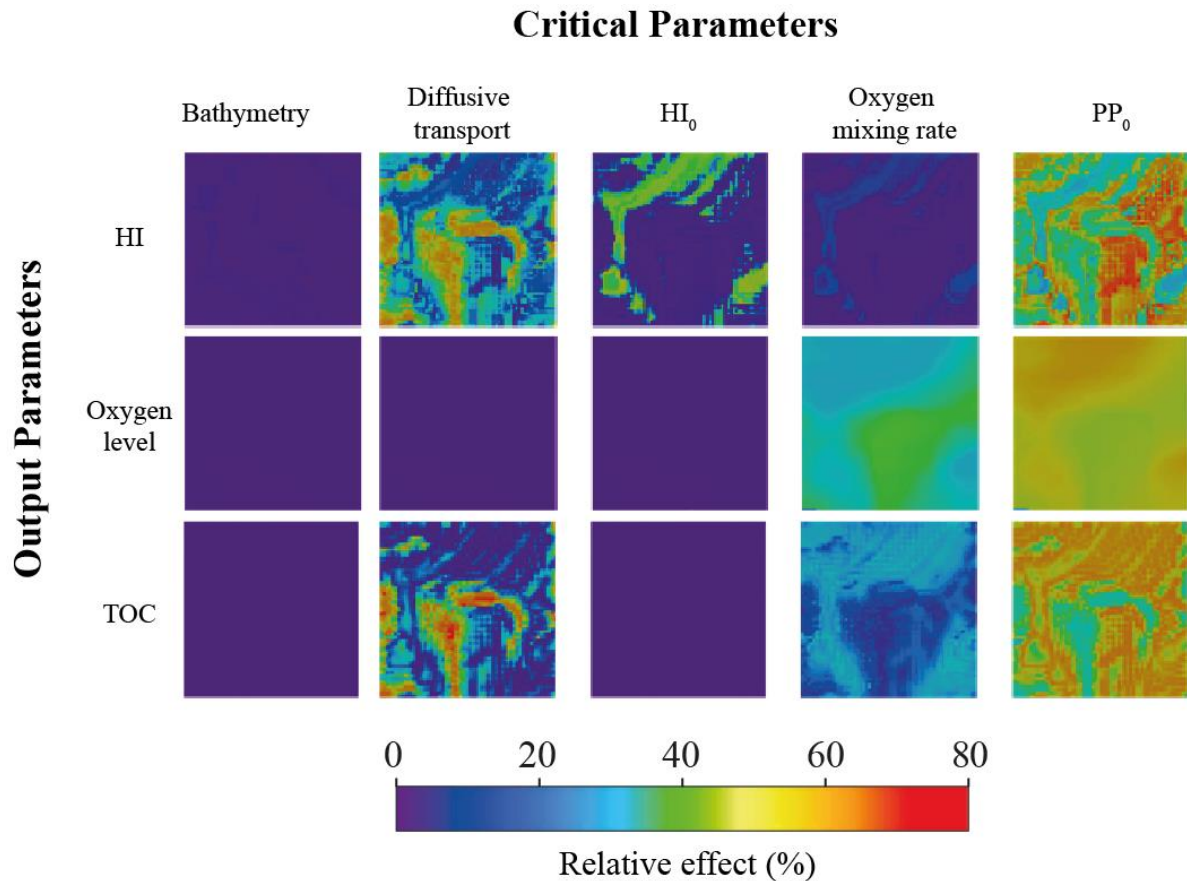


Fig. 9. Global sensitivity analyse relative effect maps for the interval 3 (182.3 to 182.1 Ma).

7.2. Bathymetry and sedimentation rate

The maximum variations allowed on bathymetry are ± 20 m from the calibrated stratigraphic model bathymetry (Table 1). Stronger variations led to different thickness and facies distribution and the calibration was no more insured. As a result of this limited variations on bathymetry, the GSA results showed a bathymetry impact under 5% on the output parameters (HI, oxygen level and TOC) (Fig. 9).

For the same reasons, no sedimentation rate variations are allowed in order to keep the calibration of the stratigraphic model. However, this parameter has a non-negligible impact on organic matter conservation and dillution (e.g. Betts and Holland, 1991).

For these reasons, the interpretation of the GSA results need some caveats. This statistical approach rather focus on the relative influence of primary productivity, oxygen level constraints and organic matter transport behavior.

7.3. Best-fit models

From the 200 meta-models of interval 3 (182.3 to 182.1 Ma) we have selected those which corresponded to the data in term of TOC distribution, oxygen level and HI (Fig. 9). In these meta-models the critical parameters are always included in the following ranges: PP_0 between 175 and 225 $gC.m^{-2}.yr^{-1}$; Organic matter diffusive transport between 0.43 to 0.5 $km^2.kyrs^{-1}$; HI_0 between 600 and 700 $mg.gC^{-1}$; Oxygen mixing rate: between 0.8 and 0.98. With these ranges

of settings, simulated organic matter distribution and heterogeneities as well as simulated oxygen depleted environments are in accordance with well data (Fig. 10).

In the rest of the discussion, GSA results are used to discuss the relative effects of the parameters and best-fit model settings are used to discuss Lower-Middle Toarcian conditions of the Paris Basin and for comparison with literature.

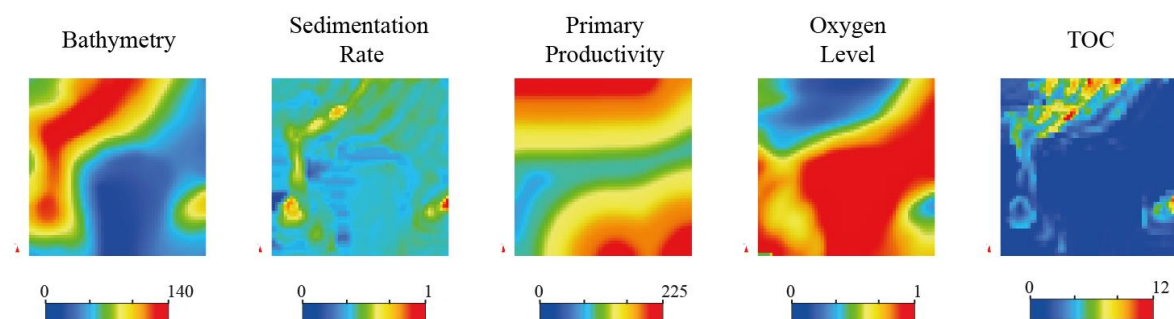


Fig. 10. Examples of best-fit meta-model which matches well data for the interval 3 (182.3 to 182.1 Ma). Parameters are included in the following ranges: PP_0 between 175 and 225 $\text{gC}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{yr}^{-1}$; Organic matter diffusive transport between 0.43 to 0.5 $\text{km}^2\cdot\text{kyrs}^{-1}$; HI_0 between 600 and 700 $\text{mg}\cdot\text{gC}^{-1}$; Oxygen mixing rate: between 0.8 and 0.98.

7.4. Oxygen level

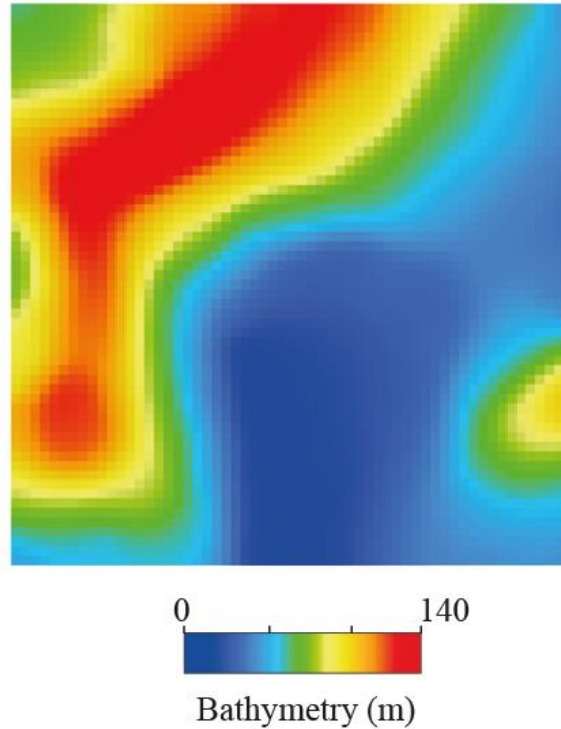
The oxygen level at sea-floor is only dependant on oxygen mixing rate and primary productivity (PP_0) which is correlated to the amount of used oxygen by organic matter consumers. The result maps of the GSA can be divided in two kinds of domain for the oxygen level (Fig. 11):

(1) The first domain correspond to shallow areas where bathymetry is under 50 m (Fig. 11). In these areas, the relative effect of oxygen mixing rate and primary productivity (PP_0) are roughly the same (between 45 and 55 %) (Fig. 9).

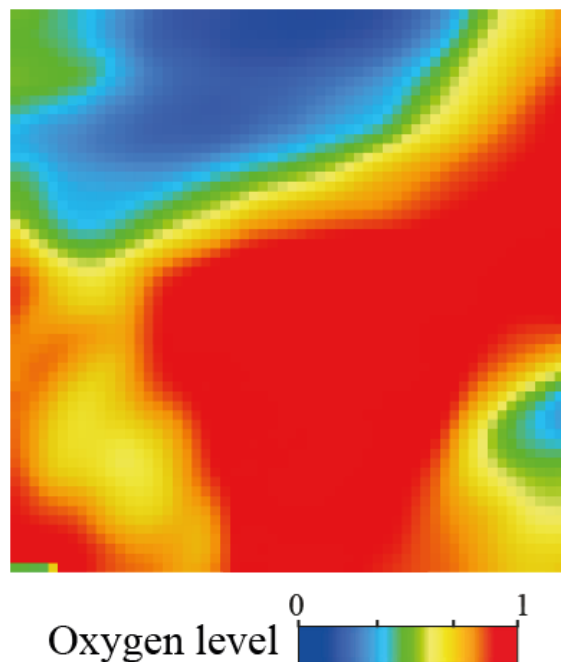
(2) The second domain corresponds to deeper areas where bathymetry is higher than 50 m (Fig. 11). In these areas, the relative effect of oxygen mixing rate is lower than in the shallowest areas (between 25 and 35 %) (Fig. 9).

The high impact of oxygen mixing rate in shallow areas is mainly linked to the strong oxygen removal due to oxygen diffusion from atmosphere but also to wind and waves agitation which both increase the mixing rate. This impact is less importante in the deepest parts of the basin where water is less agitated. Here, no deep water circulation were modellised because the Paris Basin was an epicontinental basin with low bathymetry during Lower Jurassic. Another interesting observation is that meta-models with fairly high primary productivity (more than 200 $\text{gC}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{yr}^{-1}$) provided oxygen depleted environments (oxygen level at sea floor under 0.6) (Fig. 12). This result suggests that poorly oxygenated environment or anoxia can be driven by primary productivity without involving the oxygen mixing rate. Furthermore, the oxygen depletion occurred in the deepest parts of the basin in the best-fit meta-models. This interpretation match the anoxic expanding puddle model of Wignall (1991) which has proposed a propagation of anoxia from the deepest part of the basin during transgression (Fig. 1). The driving force of this model is the development of an anoxic layer in the basin area disconnected from oxygen supply. We suggest that this anoxic layer is rather linked to the primary productivity than water stratification. This assumption is in accordance with the upwelling model proposed by Jenkyns (1985) (Fig. 1), with the exception that the oxygen minimum zone

is located in the deepest part of the basin due to the low bathymetries and water circulation of the Paris Basin during Toarcian. Nonetheless, the results indicated that the primary productivity does not need to be extremely high like in present-day upwelling areas. A primary productivity at sea surface (PP_0) of $200 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$ with a seaward decrease of $10 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$ every 10 km, is sufficient to led anoxia. These values are low to moderate by comparison with present-day shelves, but they are in accordance with the best estimates of palaeoproductivity from [Tyson \(2004\)](#).



[Fig. 11.](#) Bathymetry map of oxygen level for the interval 3 (182.3 to 182.1 Ma).



[Fig. 12.](#) Oxygen level at sea-floor map for a meta-model with a high oxygen mixing rate (0.98) and a fairly high PP_0 ($225 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$). We can expect anoxic environments in the blue areas

which correspond to the deepest parts of the basin. With this setting, the anoxia is only driven by the high amount of primary productivity.

7.5. TOC distribution

The result maps of the GSA can be divided in three kind of domains for the TOC distribution. The relative impact of critical parameters are different for these three domains (Fig. 13):

(1) The first domain represents the flat areas where the slope is almost non-existent (between 0 to 0.5 m.km^{-1} , $\sim 0.03^\circ$) (Fig. 13). In these areas, the amount of primary productivity (PP_0) is the major parameter (between 60 and 70 % of relative effect) and is associated to oxygen mixing rate (between 10 and 30% of relative effect) to determine the TOC content (Fig. 9).

(2) The second domain represents the areas where the slope is higher than 0.5 m.km^{-1} (0.03°) (Fig. 13). In these areas, the diffusive transport behavior of the organic matter is by far the major parameter (between 60 and 80 % of relative effect) to determine the TOC content (Fig. 9). The primary productivity (PP_0) contribute for the rest of the relative effect (between 20 to 40 %) and the oxygen mixing rate have a very low impact (less than 10% of relative effect) (Fig. 9).

(3) The third domain represents the depocenters which are located in the deepest parts of the basin, and where the slope is generally under 0.5 m.km^{-1} (0.03°) and the accumulation of sediment is strongest than in the other areas (Fig. 13). Here, the relative effect on TOC content is roughly the same for primary productivity (PP_0), oxygen mixing rate and diffusive transport behavior of the organic matter (between 30 and 35 %) (Fig. 9).

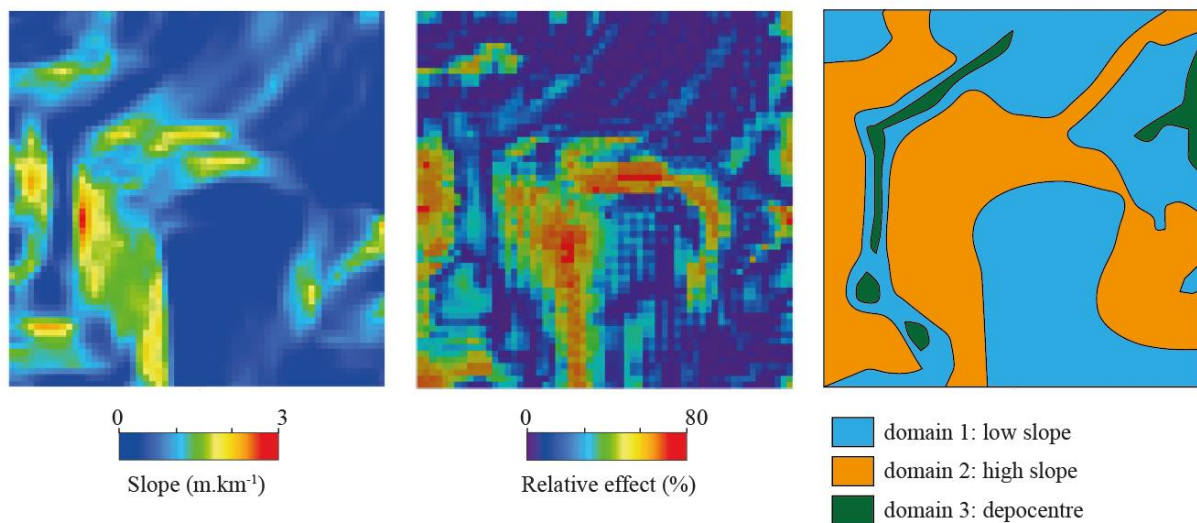


Fig. 13. a. Slope map, transport relative effect and domain of TOC distribution for the interval 3 (182.3 to 182.1 Ma).

With regard to these results, the primary productivity has a strong impact on the TOC distribution. This is due to a double effect: it increase the amount of initial available organic matter and it also provided oxygen consumption which can led to oxygen depletion in the deepest part of the basin. Nonetheless, the morphology of the basin through the relative effect of the transport is also an important factor. The organic matter sinking to the area where the slope of the ramp is higher than 0.5 m.km^{-1} (0.03°) is then transported to the central areas where the oxygen level ensure a better conservation (Fig. 9 and Fig. 13). These interpretations are in

accordance with the strong impact of nepheloid layers described by [Inthorn et al. \(2006\)](#). Furthermore, the best-fit meta-models ([Fig. 10](#)) showed that a transport behavior close to clay particles is required to obtain a good TOC distribution in the basin. The transport and spatial distribution of organic matter - shale aggregates is driven by suspension and advection under influence of nepheloid layer currents and the deposition occurs when hydrodynamism is not sufficient ([Beaulieu, 2003](#); [Inthorn et al., 2006](#)). Since the very gentle slopes in the models allowed the transport of organic matter (less than 2.5 m.km^{-1} or 0.1°), which is in accordance with the carbonate ramp environment described by [Burchette and Wright \(1992\)](#) ([Fig. 1](#)), the bottom topography also has a strong impact on TOC distribution. Such setting follows the irregular bottom topography models proposed by [Hallam and Bradshaw \(1979\)](#) or by [Röhl and Schmid-Röhl \(2005\)](#) ([Fig. 1](#)).

8. Conclusion

The balance between a high primary productivity and the factors favouring organic matter preservation represents an important part of the debate which aim to determine the conditions for the development of high organic carbon contents in sediments. The main goal of this study was to analyse the processes controlling organic matter distribution and heterogeneity through a numerical quantitative approach coupled to a statistical analyse applied to the Lower-Middle Toarcian succession of the Paris Basin. A Global Sensitivity Analyse was performed on oxygen mixing rate, primary productivity, HI_0 and diffusive transport of organic matter with CougarFlow© on 1400 3D numerical meta-models built with the software DionisosFlow© Organic-Rich Sediment. The results and associated interpretations allow us to draw several important conclusions:

- (1) The primary productivity has a strong impact on oxygen level in shallow epicontinental basins. It can led to anoxia even with low productivity levels ($< 175 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$) in areas where the bathymetry is deeper than 50 m. A low oxygen mixing rate can also led to anoxia, but the resulting modelled TOC distribution is therefore not in accordance with the Paris Basin data.
- (2) The diffusive transport behaviour of organic matter (in the form of organo-mineral floccules) has to be similar to clay particles to reproduce the TOC distribution observed in the Lower-Middle Toarcian of the Paris Basin. It highlights the strong impact of nepheloid layer currents and hydrodynamism on the distribution of the organic matter provided by the primary productivity, even in carbon ramp environments where the slope is under 0.1° .

These quantitative approach and its conclusions opens new perspectives about the understanding of global distribution of organic-rich sediments. We suggest that the current debate opposing primary productivity vs oxygen level, which widely concentrated the studies about organic-rich deposits in the last decade, should be widened. As the organic matter seems to act as an important factor for its one preservation by decreasing the oxygen level (without involving water stratification), the primary productivity is obviously a key parameter that govern organic matter distribution and heterogeneities. That being said, this process in its entirety (from primary production at sea surface to oxygen consummation in the basin) is totally linked to the basin morphology. In upwelling areas, the oxygen minimum zone which preserved organic matter is induced because of the high primary productivity linked to the high nutrient supply. This high nutrient supply is itself linked to large and open oceanic basins which allowed specific conditions of the winds regime and water mass circulations. In the case of epicontinental basins, the transport of the organo-mineral floccules along the slope drives the location of oxygen depletion and organic matter accumulation.

Addendum

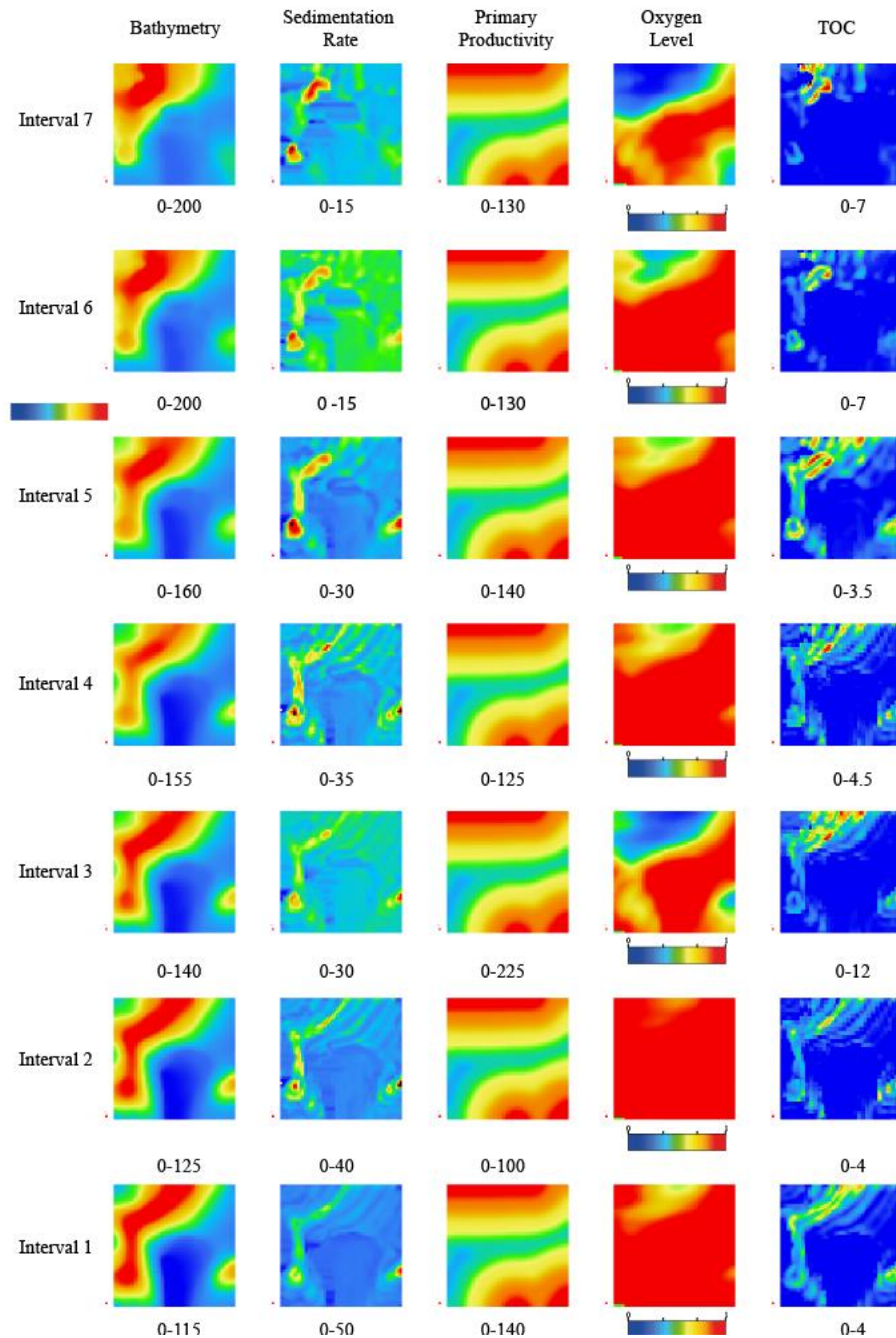
This paper is still in preparation and several points which have not been addressed or partially discussed are in progress:

HI distribution: For now, the calculated HI is not correct. Even if the equation brings the good tendencies, more work is required to ensure results which will allow a correct statistical analyse.

Evolution of the critical parameters through time: The modelling + statistical analyse were performed for the 7 intervals ([Fig. 4](#)). The GSA results are the same, but obviously, the selected best-fit meta-models are not similar for all these intervals. More work is still required to interpret the evolution of the settings of the meta-models and to perform comparison with literature.

For now, the most important bias remains the sedimentation rate which act in favour of organic-matter conservation (speed of isolation from the environment), but especially which dilute it into the non-organic sediment. In our simulations, no variation are applied to the sedimentation rate in order to keep the calibration on facies and thickness.

For now, if we look at the results of the different intervals, it seems that both organic-rich deposits and high sedimentation rates are located in the depocentre areas ([Annexe 1](#)). Nonetheless, if we look at these areas in detail, there is not a systematic association of high/low sedimentation rate with high/low TOC. Such observations have to be considered carefully: the sedimentation rates are roughly the same from an interval to another (maximum value of 15 to 50 m.Ma⁻¹, depending on the interval) and the mean values are low (which is only representative of specific basins).



Annexe 1. Bathymetry, Sedimentation Rate, Primary Productivity, Oxygen level and TOC of the best-fit models for the 7 intervals.

CHAPITRE 7 – DISCUSSION GENERALE

Introduction

Au vu de l'ensemble des données acquises et interprétées, de leur confrontation avec la littérature et des différentes discussions conduites dans les chapitres précédents, ce chapitre a pour objectif d'apporter une discussion générale, des conclusions et les perspectives des principales leçons tirées de ce travail sur la hiérarchisation des différents facteurs et processus intervenant dans la sédimentation organique dans les bassins épicontinentaux d'Europe pendant le Jurassique inférieur.

Il convient de souligner un point important concernant la démarche de modélisation numérique employé dans ces travaux. Cet outil peut être exploité dans deux contextes différents :

1) L'outil de modélisation numérique peut être utilisé à des fins de recherche fondamentale. L'objectif est alors d'utiliser les résultats du modèle calibré et comparable avec de nombreuses données pour déterminer la pertinence et l'effet relatif de chaque paramètre d'entrée. Après cette prise de recul, les paramètres de sortie sont discutés et comparés avec la littérature afin de critiquer et d'approfondir les connaissances actuelles.

2) L'outil de modélisation numérique peut être utilisé dans une démarche exploratoire. Dans cette approche, l'outil est considéré comme une solution préférable malgré ses limites. Les modèles simulés et calibrés sont utilisés pour calculer les paramètres de sortie dans des zones où les données sont inexistantes ou trop peu nombreuses pour permettre la calibration.

La suite de la discussion est articulée autour de l'approche fondamentale décrite dans le premier point qui a été la démarche entreprise dans ces travaux de thèse.

.1 L'approche numérique et statistique

La spécificité de ces travaux de thèse a été de coupler une approche naturaliste-analytique à la modélisation numérique. En effet, les grandes questions qui ont déterminé cette recherche gravitent autour des processus gouvernant la distribution et les hétérogénéités de la matière organique, et de leur quantification relative. De nombreuses études se sont spécifiquement penchées sur ces processus, apportant des lois ou des équations décrivant leur comportement. Néanmoins, les tentatives d'étude intégrant l'ensemble de ces processus sont peu nombreuses et le caractère interdépendant de ces derniers et l'absence de réelle quantification rend la hiérarchisation des facteurs clés très compliquée. Nombre de ces études ont souvent conduit à mettre en avant certains processus sans réel recul sur les interactions possibles avec les autres facteurs. De plus, les résultats de ces études sont souvent extrapolés comme un constat global à partir des observations spécifiques à un âge ou un bassin donné.

Ce premier bilan tiré des discussions proposées dans la littérature, souligne l'importance capitale de deux aspects dans la compréhension de la formation des roches mère : 1) l'importance de considérer l'ensemble des paramètres ayant une influence non négligeable sur

la matière organique ; 2) l'importance d'apporter une quantification à l'ensemble de ces paramètres.

La modélisation stratigraphique normale, permet de simuler l'évolution des bassins par pas de temps. Cette évolution se fait sur la base des lois de transport et de production des sédiments et par le principe d'équilibre des masses. Cette conception « orientée processus » de la modélisation, permet d'introduire de nouveaux paramètres et de simuler de nouveaux facteurs à partir des lois et des équations décrites dans la littérature. Le nouveau module Organic-Rich Sediments permet ainsi d'ajouter les processus gouvernant l'histoire de la matière organique dans un modèle stratigraphique DionisosFlow conventionnel : la productivité primaire, le flux de carbone, le transport de la matière organique, le niveau d'oxygène et l'efficacité d'enfouissement (voir **CHAPITRE 3**). Cet outil a apporté la dimension quantitative à l'étude intégrée de l'ensemble de ces processus.

Ces travaux ont montré l'importance et les limites de cette approche numérique. Un premier constat réalisé très tôt dans ces travaux de thèse, a mis en avant la quantité importante de données nécessaires pour conduire une étude efficace grâce à cet outil. Outre un cadre chronostratigraphique clairement défini et des données sur les épaisseurs et les faciès afin de reconstituer et calibrer le modèle numérique stratigraphique classique, des données sur le contenu organique sont également nécessaires pour comparer les résultats des simulations au cas réel. Ainsi, les hétérogénéités de contenu organique observées dans les données peuvent être importantes à toutes les échelles (centimétrique à kilométrique). Cet aspect démontre la variabilité des processus impliqués dans le temps et l'espace et soulève des questions sur la représentativité des mesures (i.e. échantillonnage, lissage) à partir desquelles sont comparés les modèles numériques.

La première étude réalisée sur le bassin Lusitanien a mis en évidence que certains facteurs non simulés, comme la bioturbation ou les événements gravitaires, pouvaient avoir une influence non négligeable sur la distribution de la matière organique. En outre, certains paramètres capitaux simulés dérivent directement d'autres facteurs qui ne sont pas pris en considération dans les modèles. On pourrait ainsi mentionner la productivité primaire, elle-même dépendante des apports en nutriments, de l'insolation, de la turbidité des eaux de surface, etc., ces facteurs étant eux même dépendants du climat, de la morphologie des bassins versants, entre autres. Le véritable enjeu de l'approche par modélisation numérique tourne autour de cette problématique : dans quelle mesure peut-on modéliser un système aux variables complexes, interconnectées et nombreuses ? [Tyson \(2005\)](#) souligne que les modèles théoriques actuels et l'opposition production vs préservation de la matière organique qui y est associée, monopolisent le débat et ont tendance à occulter d'autres paramètres potentiellement aussi importants (e.g. taux de sédimentation). La modélisation numérique apporte une solution en se proposant de quantifier ces paramètres interconnectés, mais elle fait dans le même temps écho à l'avertissement de Tyson : comment ne pas s'enfermer dans une conception trop simpliste et négliger certains processus si certains ne sont pas modélisés ou que les lois empiriques les décrivant ne reflètent qu'une tendance globale actuelle ? La réponse est apportée par la modélisation numérique « orientée processus » elle-même. Chaque processus est appréhendé de manière « isolé » et est simulé par l'application d'équations ou de lois empiriques proposées et débattues dans la littérature par divers auteurs. Ainsi, pour une simulation donnée, le modèle obtenu ne traduit que le résultat de ces équations pour une certaine gamme de paramètres d'entrée. Ce résultat est aussi valorisable qu'un modèle théorique, à ceci près que la quantification des paramètres d'entrée et de sortie permet davantage de discussion. La première étude sur le bassin Lusitanien a ainsi mis en évidence que pour simuler des « pulses » de TOC équivalents aux données de terrain, deux types de simulations étaient possibles : une forte

productivité primaire ou bien une diminution du niveau d'oxygène forcée, les deux cas conduisant à un environnement anoxique comme suggéré par les données de terrains.

A ce stade, il convient de préciser que la distribution et les hétérogénéités de la matière organique dans les modèles simulés résultent de nombreux paramètres. L'interprétation en est souvent compliquée. La seconde étude sur les bassins nord-européen a permis d'identifier et de décrire plusieurs types de zone d'accumulation de la matière organique, d'y associer un certain contexte séquentiel et paléogéographique, et de quantifier les valeurs des différents paramètres associés. Ce procédé a permis un certain nombre d'interprétations et a très largement conduit à entamer la discussion quant à la distribution de la matière organique. Cependant la hiérarchisation des processus impliqués construite sur la base des modèles calibrés reflète davantage la description des valeurs des paramètres dans les zones riches en matière organique qu'une réelle quantification de l'effet relatif de chaque processus. Ce constat a conduit à mener la troisième étude avec une méthodologie différente. La zone et l'intervalle de temps étudiés ont été réduits pour permettre une meilleure calibration du modèle stratigraphique classique. Les paramètres relatifs à la matière organique ont ensuite été introduits via CougarFlow. Ce logiciel permet, dans un premier temps, la création de méta-modèles dans lesquels les paramètres d'entrée varient selon une gamme définie (i.e. pour cette étude : coefficient de mélange de l'oxygène, productivité primaire, transport diffusif de la matière organique, IH initial). Dans un second temps, une analyse statistique de sensibilité globale permet de calculer l'effet relatif de chaque variable d'entrée sur les paramètres de sortie (i.e. pour cette étude : TOC, niveau d'oxygène, IH). Ces étapes supplémentaires dans le procédé méthodologique permettent d'établir formellement l'effet relatif des différents processus là où l'approche numérique seule ne permet qu'une hiérarchisation semi-quantitative « intuitive » (les différentes rétroactions et l'influence des paramètres n'étant pas toujours identifiable de manière évidente). Ainsi, l'étude statistique présentée dans le **CHAPITRE 6** a permis de mettre en évidence le fort impact du transport de la matière organique et plus précisément celui de la morphologie de la rampe carbonatée sur la distribution de la matière organique. Ce facteur avait déjà été mis en avant dans les précédentes études (bassin Lusitanien et bassins nord-européens), mais sans quantification de son effet relatif, son impact avait été sous-estimé.

Finalement, la modélisation numérique orientée processus couplée à l'analyse statistique permet d'ajouter une dimension quantitative à l'approche naturaliste et aux modèles conceptuels. Il reste cependant nécessaire d'être attentif car cette quantification n'est fournie que dans le cadre d'un système simplifié soumis aux effets de bord. Cette ambivalence permet néanmoins d'identifier les éventuelles lacunes dans les équations et lois empiriques construites à partir des observations actuelles. Elle permet également de mettre en évidence les cas où des processus non considérés jouent probablement un rôle clé (e.g. bioturbation, événements gravitaires). Enfin, au vu des résultats des simulations des différentes études et de leur comparaison avec les données, les phénomènes et lois considérés actuellement dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments semblent très satisfaisants dans la majorité des cas et permettent une évaluation poussée des facteurs de contrôle de la distribution et des hétérogénéités de la matière organique.

.2 Lois empiriques et équations

Comme expliqué dans le paragraphe précédent, les lois empiriques et équations traduisant les processus gouvernant l'histoire de la matière organique, sont construites à partir des observations et analogues actuels. Cette construction soulève deux questions fondamentales :

- 1) Dans quelle mesure les observations actuelles et les lois en découlant sont-elles transposables dans le passé et, plus spécifiquement, au Jurassique inférieur ?
- 2) L'observation, description et mise en équation d'un processus correspond-elle bien à la réalité, ou en d'autres termes, la loi empirique ne traduit-elle pas la résultante et l'interaction de plusieurs processus perçus comme un seul ?

La première question fait référence à la différence de conception fondamentale dans la façon d'aborder les Sciences de la Terre soulevée par [Lyell \(1830-1833\)](#). Cette différence a longtemps opposée la vision uniformitariste à la vision catastrophiste. La première postule que les processus qui se sont exercés dans un passé lointain s'exercent encore de nos jours. Par opposition, la seconde met en avant l'influence d'événements ponctuels ayant gouvernés le développement de la Terre. Aujourd'hui le sens du terme « uniformitarisme » a largement évolué ([Romano, 2015](#)). Le principe d'actualisme s'est démocratisé et reprend les fondements de la version moderne de l'uniformitarisme *sensu lato* : les processus naturels actuels sont transposables au passé. Cette définition reste très ouverte et le sens du mot processus varie très largement en fonction des auteurs.

En ce qui concerne ces travaux, considérer les lois physiques et chimiques élémentaires comme similaires à l'Actuel est un argument *ad hoc*. En revanche, il est moins évident que l'ensemble des paramètres influençant les processus étudiés ait été similaires dans le passé et à l'Actuel. En somme, cet aspect rejoint la deuxième question : toutes les composantes d'un processus sont-elles bien identifiées ? Ont-elles pu évoluer au cours du temps ? Et, ne sont-elles pas des variables à considérer comme un autre processus à part entière ?

Les différentes études présentées dans ce mémoire de thèse apportent des pistes pour répondre à ces questions. Néanmoins, ces explications nécessitent d'être resituées dans le contexte des études et de ne pas se détacher du cheminement conception – expérimentation – discussion. La suite de ce paragraphe ne vise pas à répondre directement aux questions posées précédemment, mais à rappeler la façon dont ont été conçues les équations et lois empiriques décrivant les processus modélisés. Les paragraphes suivants prendront plus de recul en discutant les résultats globaux des études, en entreprenant de critiquer objectivement le module de modélisation de la matière organique, et en proposant un certain nombre de recommandations pour améliorer les équations et lois empiriques.

Conception des équations et lois empiriques décrivant les processus :

La productivité primaire :

Il s'agit probablement d'un des processus les plus compliqués à résumer par une loi empirique. En premier lieu ce processus est la résultante de plusieurs facteurs comme expliqué précédemment (e.g. climat, apport en nutriments). Dans l'idéal, l'équation décrivant la productivité primaire devrait donc tenir compte de ces nombreux facteurs. Néanmoins, pour des raisons techniques, cette solution n'est pas forcément la plus optimale. En effet, le temps

de travail pour décrire l'ensemble de ces facteurs dans le passé serait décuplé, et les temps de calcul pour les simulations du modèle seraient considérablement allongés. De plus, les erreurs induites par les différents proxies permettant de décrire ces facteurs seraient multipliées. Enfin et surtout, il ne s'agirait que d'un report du problème car ces facteurs sont eux-mêmes la résultante de nombreux processus.

Le choix de faire de la productivité primaire une des premières briques élémentaires de la construction du modèle est donc pertinent. Cependant, l'estimation de la productivité primaire à l'Actuel présente de nombreux biais comme expliqué dans le **CHAPITRE 1**. L'estimation des paléo-productivités soulève donc un certain nombre de questions. En plus du fait que les organismes vivants aient pu évoluer avec le temps, les proxies enregistrant la productivité primaire (e.g. quantité de phosphate dans le sédiment) sont peu nombreux et leur enregistrement dépend également souvent du niveau d'oxygénation. Cet état de fait a conduit [Chauveau \(2014, 2015, 2016\)](#) à considérer la loi décrivant la productivité primaire dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments comme un choix de l'utilisateur. Plusieurs options permettant de reproduire les analogues actuels sont proposées, mais pour des raisons techniques, seul la production primaire fonction de la distance à la côte a été testée (voir **CHAPITRE 3**). Cette approche semble cohérente avec les mesures moyennes sur plusieurs années faites à partir des observations satellites et avec les conclusions de plusieurs études (e.g. [Berger et al., 1989](#) ; [Pilson, 2012](#) ; [Sathyendranath et Platt, 2013](#)). En somme, en tant que paramètre d'entrée, la distribution des paléo-productivités primaires est fondée sur un ensemble d'études et d'observations des analogues actuels soumis à discussion. Ce socle a fourni une base pour la conception de la loi empirique décrivant la productivité primaire. En revanche, la quantité de celle-ci reste le choix de l'utilisateur et représente une inconnue à prendre en considération dans les études numérique.

Le niveau d'oxygénation :

La discussion sur la conception de la loi décrivant le niveau d'oxygénation à l'interface eau-sédiment rejoint les points abordés pour la productivité primaire. En effet, le niveau d'oxygénation est un processus régi par de nombreux facteurs (e.g. diffusion d'oxygène depuis l'atmosphère vers l'océan, stratification de la colonne d'eau, consommation par les organismes vivants, approvisionnement par les circulations profondes). Le choix de faire du niveau d'oxygénation une des premières briques élémentaires de la construction du modèle semble être pertinent pour les mêmes raisons que celles évoquées pour la productivité primaire.

La présence d'un environnement anoxique ou appauvri en oxygène est attestée par un certain nombre de marqueurs dans les données (e.g. spécificité des espèces, absence de bioturbation, présence de pyrite) ([Wignall, 1994](#)). En revanche, même si ces marqueurs peuvent théoriquement être associés à une quantité d'oxygène par volume d'eau, il reste en pratique quasi-impossible de déterminer précisément celle-ci. La loi proposée par [Chauveau \(2014, 2015, 2016\)](#) permet de calculer le niveau d'oxygène à l'interface eau-sédiment à partir d'un niveau d'oxygène de référence en surface, de la productivité primaire en surface et d'un coefficient de mélange en profondeur (voir **CHAPITRE 3**). Il est exprimé par une valeur sans dimension allant de 0 (environnement totalement anoxique) à 1 (environnement complètement oxygéné). Ce profil vertical du niveau d'oxygénation basé sur les travaux de [Mann et Zweigel \(2008\)](#), permet de faire intervenir les principaux paramètres régissant le niveau d'oxygénation selon les observations actuelles. Un forçage de stratification des eaux peut-être simulé en diminuant l'oxygène de référence, les circulations profondes peuvent être simulées en augmentant le coefficient de mélange et les zones à minimum d'oxygène sont régulées par la productivité primaire. Par ailleurs, de par sa conception, le niveau d'oxygénation ne représente que l'interface eau sédiment. La déplétion en oxygène de niveaux intermédiaires entre la surface et le sédiment n'est pas prise en considération.

Flux de carbone :

L'équation traduisant le flux de carbone (sous la forme d'agrégats organo-minéraux) depuis la surface jusqu'au sédiment est issu des travaux de [Martin et al. \(1987\)](#) (voir **CHAPITRE 3**). Dans cette équation, le flux de carbone est fonction de la productivité primaire et de la bathymétrie. D'autres études sont venues confirmer ces observations et montrer la pertinence de cette équation ([Berger et al., 1989](#) ; [Honjo et al., 2008](#)).

Cependant, les cas d'études sont toujours relatifs à des milieux océaniques et non à des mers épicontinentales. De plus, l'estimation du flux de carbone dans les 100 premiers mètres de la colonne d'eau est très hasardeuse étant donné que la productivité primaire a lieu dans cette tranche d'eau et qu'il s'agit de la zone soumise à l'action des vagues. Par ailleurs, [Berelson \(2001\)](#) suggère que, dans l'équation de Martin, le paramètre de calibration n est probablement lié aux conditions redox. Cette suggestion rejoint le fait que le niveau d'oxygénation simulé ne prend pas en compte la concentration en oxygène des niveaux intermédiaires de la colonne d'eau et soulève la question de leur influence sur le flux de carbone.

Transport de la matière organique :

L'équation de transport diffusif linéaire ([Granjeon, 1996](#)) utilisée dans DionisosFlow pour simuler le transport de la matière organique sous la forme d'agrégats organo-minéraux est la même que celle des sédiments inorganiques. Les valeurs utilisées pour simuler leur dynamique sédimentaire sont celles de sédiments fins (silts et argiles).

Cependant cette équation suppose que le transport diffusif est proportionnel à la pente locale. Or plusieurs études tendent à montrer que la mobilisation et redistribution spatiale des agrégats organo-minéraux va s'effectuer par resuspension, advection et phénomènes tractifs sous l'influence de courants de fond ou à l'occasion d'événements tels que les tempêtes, en suivant les gradients d'énergie hydraulique ([Thomsen et van Weering 1998](#) ; [Thomsen et McCave, 2000](#) ; [Thomsen et Gust, 2000](#) ; [Beaulieu, 2003](#) ; [Inthorn et al., 2006](#)). Dans le détail l'hydrodynamisme paraît être un facteur capital du transport de la matière organique, mais en pratique, l'équation de transport diffusif linéaire semble traduire le transport de la matière organique de manière efficace.

Efficacité d'enfouissement :

L'équation traduisant l'efficacité d'enfouissement dans DionisosFlow Organic Rich-Sediments est directement inspirée des travaux de [Bett et Holland \(1991\)](#). Cette équation basée sur une approche physique rend compte de la quantité de carbone organique qui est préservée de la dégradation après les premiers mètres d'enfouissement (i.e. diagenèse précoce) et qui contribue au TOC initial de la roche. Les principaux paramètres intervenant sont la quantité de carbone arrivant en contact avec le sédiment (flux de carbone + transport de la matière organique), le taux de sédimentation ([Betts et Holland, 1991](#)) et les conditions redox du milieu ([Tyson, 1995](#)). Cependant cette équation suppose qu'il existe une relation entre le taux d'oxygène à l'interface eau – sédiment et la profondeur de pénétration de l'oxygène dans les couches de sédiments. Cet aspect est influencé par la présence d'organismes fousseurs (bioturbation) qui ne sont pas pris en considération dans cette équation. Par ailleurs, le modèle n'est actuellement pas capable de gérer plusieurs étapes de diagenèse (e.g. remobilisation et second enfouissement après une érosion). De plus, le taux de dégradation au cours du temps en fonction de la durée d'enfouissement de la matière organique n'est pas encore simulable ([Burdige, 2007](#)).

Continuité spatio-temporelle :

Outre la conception des équations et lois empiriques utilisées pour simuler les différents processus dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments, la façon dont sont modélisés le temps et l'espace dans un modèle numérique peut soulever un certain nombre d'interrogations. Dans

les modèles simulés lors de ces travaux de thèse, la continuité dans le temps et l'espace est assurée respectivement sous la forme de pas de temps et de cellules non-contraintes en épaisseur.

Dans les simulations effectuées, les cellules varient entre 5 et 10 km de côté et les pas de temps varient entre 100 ka et 1 Ma. Les épaisseurs de sédiments déposés durant ces pas de temps peuvent dépasser la centaine de mètres. La résolution des équations rendant compte des différents processus se fait donc sur des temps, distances et volumes importants. De la même manière, les paramètres de sortie (e.g. TOC, niveau d'oxygénation) sont des valeurs moyennes pour un pas de temps et un rapport volume/surface donnés inhérents à la conception du modèle. Certaines équations tiennent compte de ces grandes échelles (notamment celle du transport des sédiments ; [Granjeon, 1996](#)). Cependant, la majorité d'entre elles est directement conçue à partir d'observations empiriques contemporaines s'étalant sur des périodes de temps quasi-instantanées en comparaison des pas de temps simulés. Si l'aspect moyenné en termes d'espace est interprétable et comparable à l'Actuel, en revanche, la validité de ces équations et lois empiriques pour de longues durées est questionnable. [Wignall \(1994\)](#) suggère, par exemple, qu'une brève ré-oxygénation (sur quelques mois) d'un sédiment enfoui peut complètement oblitérer le signal organique initial. La pertinence d'une moyenne du niveau d'oxygénation à l'interface eau – sédiment sur un pas de temps de plusieurs milliers d'années est donc questionnable. Les résultats des modèles numériques présentés au cours des différentes études ont été interprétés et comparés aux tendances moyennes des données (notamment en terme de TOC) plutôt qu'au signal précis. En effet, les variations hautes fréquences des données de TOC ne sont pas modélisables (sauf pour une étude spécifique sur quelques pas de temps réduits comme proposé dans la première étude), car les variations des processus entrant en jeu ont lieu sur des durées très inférieures au pas de temps du modèle.

.3 Hiérarchisation des processus

En regard des résultats et des discussions proposées pour les différentes études conduites lors de ces travaux, il apparaît qu'il n'existe pas un cas général pour l'accumulation de dépôts riches en matière organique, mais plutôt plusieurs fenêtres optimales résultant de la convergence de plusieurs processus. Cette conclusion contraste avec les littératures contemporaines et plus anciennes qui canalisent le débat autour de l'influence relative de la conservation et de la production de la matière organique ([Demaison et Moore, 1980](#) ; [Pederson et Calvert, 1990](#) ; [Tsyon, 2005](#)). Cette opposition est directement influencée par les deux analogues actuels permettant l'accumulation de matière organique : les zones d'upwelling et les bassins stratifiés.

Dans le cas du Jurassique inférieur européen, le développement d'upwelling *sensu stricto* semble peu probable étant donné la structuration prononcée des différents bassins empêchant le développement de circulation d'eau profonde et les remontées de nutriments associées. Par ailleurs, les faibles bathymétries et la morphologie des bordures du bassin ne semblent pas appropriées pour la mise en place de cellules d'upwelling pérennes comme décrit à l'Actuel par les océanographes ([Garvine, 1973](#) ; [Pitcher 2011](#)). L'appellation « upwelling » a souvent été utilisée au sens large dans les études portant sur le Jurassique inférieur européen pour désigner

le développement de zones à minimum d'oxygène intrinsèquement liées à de forts apports de nutriments depuis les massifs émergés (Fleet et al., 1987 ; Jenkyns, 1999).

Dans le cas d'upwellings *sensu lato* et de bassins seuillés, les mêmes processus sont mis en avant : soit la forte productivité primaire des zones d'upwelling entraîne le développement d'une zone à minimum d'oxygène permettant de conserver une matière organique déjà présente en quantité importante ; soit l'environnement confiné et stratifié permet le développement de dysoxie ou d'anoxie permettant de conserver la matière organique issue d'une productivité primaire suffisamment importante (l'apport de matière organique terrestre étant également possible). Il convient donc de rappeler que dans le cas de l'upwelling le moteur de l'accumulation de niveaux riches en matière organique est bien la productivité primaire et, dans le cas des bassins stratifiés, la conservation préférentielle de la matière organique en est la composante principale. Cependant un paradoxe s'impose : le développement de ces deux cas de figure nécessite un contexte physiographique et morphologique du bassin bien spécifique. Autrement dit, même si la production ou la conservation de la matière organique sont des facteurs clés, il semble capital de ne pas s'affranchir des paramètres intrinsèques aux bassins (i.e. la morphologie et les paramètres en découlant : bathymétrie, topographie, subsidence, taux de sédimentation, etc.) qui vont déterminer la fenêtre pendant laquelle production et conservation sont réellement « efficaces ». L'inertie du débat actuel, qui continue d'opposer les deux courants de pensées production vs conservation, occulte ces facteurs pourtant capitaux.

La deuxième étude sur les bassins nord-européens a montré l'importance du transport des agrégats organo-minéraux sur la distribution de la matière organique. Cet aspect a été largement confirmé par l'analyse statistique de sensibilité globale proposée dans la troisième étude sur le bassin de Paris. En effet, le transport des agrégats organo-minéraux dans les couches néphéloïdes présente un comportement similaire aux particules argileuses. De faibles pentes de l'ordre de quelques dixièmes de degrés sont suffisantes pour mobiliser ces particules et permettre leur redistribution dans les parties plus profondes du bassin. Ces observations vont dans les sens des travaux de plusieurs auteurs ayant décrit le transport de la matière organique (Thomsen et Van Weering 1998 ; Thomsen et McCave, 2000 ; Thomsen et Gust, 2000 ; Beaulieu, 2003 ; Inthorn et al., 2006). L'effet de la topographie de fond joue alors un rôle déterminant dans la distribution de la matière organique. Son accumulation se fait principalement dans les dépocentres sur des épaisseurs de plusieurs dizaines de mètres (taux de sédimentation $> 40 \text{ m.Ma}^{-1}$) avec des TOC supérieurs à 5 wt %. La migration de ces zones d'accumulation se fait en fonction de la distance à la côte et des zones de subsidence. La topographie de fond dans les zones proximales des bassins ou au niveau des seuils, peut également permettre le dépôt de niveaux riches en matière organique associés à une sédimentation plus grossière mais sur des épaisseurs beaucoup moins importantes (quelques mètres au maximum). Ce dernier point reste cependant difficilement vérifiable par les données car la grande majorité de ces zones a été érodée.

Par ailleurs, les études numériques ont montré que les niveaux anoxiques se développaient dans les zones d'accumulation de la matière organique au niveau des dépocentres. Cet effet est directement lié à la consommation d'oxygène associée aux organismes dégradant la matière organique. L'analyse statistique a en effet permis de montrer que l'effet relatif du taux de mélange de l'oxygène avait un impact peu important, et que la productivité primaire était la cause principale de la diminution du niveau d'oxygène. De plus, une diminution du coefficient de mélange de l'oxygène n'a pas permis d'obtenir dans les simulations une distribution de la matière organique similaire aux données. Les valeurs de productivité primaire nécessaires pour

entraîner le développement de l'anoxie ($200 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$) sont modérées par rapport aux valeurs moyennes de rampes carbonatées actuelles ($360 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$) (Stiling, 1996).

Ces constats peuvent sembler contradictoires, mais là encore, la morphologie des bassins semble jouer un rôle. Dans la majorité des analogues actuels, les rampes carbonatées se développent dans des mers ou océans ouverts, là où les grandes circulations profondes thermohalines sont possibles. Même si les apports en nutriments sont suffisants pour que la productivité primaire engendre une baisse significative du niveau d'oxygène et qu'un niveau à minimum d'oxygène se développe, il ne s'agit pas d'une situation à l'équilibre (Tyson et Pearson, 1991). Le réapprovisionnement en oxygène par les circulations profondes ne permet sans doute pas une déplétion en oxygène autrement qu'à l'état transitoire. Une zone à minimum d'oxygène peut en revanche être maintenue de façon plus pérenne si la consommation d'oxygène associée à la productivité primaire est supérieure au réapprovisionnement en oxygène au cours du temps. C'est notamment le cas pour les cellules d'upwelling *sensu stricto* où l'apport en nutriment est très important et où les productivités primaires sont en moyenne de $500 \text{ gC.m}^{-2}.\text{yr}^{-1}$ (Stiling, 1996).

Les résultats des différentes études de ces travaux de thèse laissent à penser que, dans le cas des bassins du Jurassique inférieur européen, le développement de zone à minimum d'oxygène serait induit par une productivité primaire peut élevée. La configuration confinée des bassins empêchant le développement de circulation profonde, ces zones à minimum d'oxygène seraient en grande partie préservées du réapprovisionnement en oxygène. Par ailleurs, les faibles bathymétries des bassins contribueraient fortement à ce que l'appauvrissement en oxygène se propage rapidement au-delà des 300 m de profondeur, là où la perte d'oxygène semble maximum (Fig. 47) (Boyer et al., 2009).

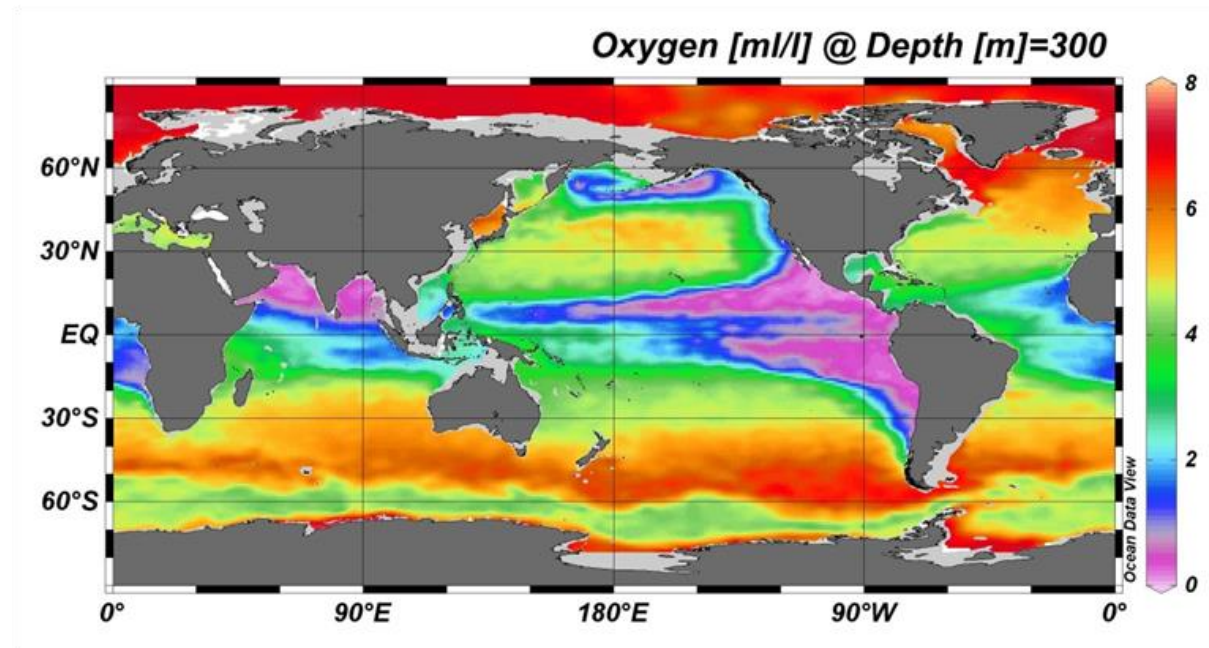


Fig. 47. Extension maximum des zones à minimum d'oxygène (d'après Boyer et al., 2009).

La stratification de la colonne d'eau serait alors similaire à l'analogue contemporain de la Mer Noire. Le moteur de cette stratification serait lié à une productivité primaire relativement faible couplée à une morphologie confinée des bassins et de faibles profondeurs d'eau.

En définitive, la morphologie des bassins aurait un impact tant sur la distribution que sur la conservation de la matière organique. Cet effet double est également couplé aux taux de sédimentation relativement faibles des plateformes carbonatées du Jurassique inférieur (de l'ordre de quelques dizaines de mètres par million d'années en moyenne avec des maximums de 70 m.Ma⁻¹ dans les dépocentres à l'exception du bassin du Sud-Est et de l'Hettangien du bassin Aquitain, beaucoup plus subsidents) par rapport aux moyennes actuelles (jusqu'à 200 m.Ma⁻¹, [Tyson et Pearson, 1991](#)). Or, la présence d'environnements appauvris en oxygène couplée à de faibles taux de sédimentation permet de diminuer la dilution de la matière organique dans le sédiment sans que sa conservation n'en soit affectée. L'analyse statistique de sensibilité globale de la troisième étude n'a pas permis de mettre en évidence l'effet relatif du taux de sédimentation car ce paramètre devait être invariant lors de la création des méta-modèles afin de conserver la calibration. Une estimation basée uniquement sur les valeurs de taux de sédimentation reste hasardeuse car les fortes valeurs de TOC sont associées aux zones d'accumulation de sédiment des dépocentres (et donc aux taux de sédimentation les plus élevés). Néanmoins, il est fort probable que ces faibles taux d'accumulation aient un impact favorable sur l'accumulation de la matière organique dans ce contexte.

Finalement, la distribution de la matière organique simulée dans les différents modèles numériques calibrés est très similaire à celle proposée dans les différents modèles théoriques de la littérature (voir [CHAPITRE 1](#), section [Modèles théoriques](#)). Les modalités et les mécanismes clés de la mise en place des dépôts riches sont en revanche différents. Cet aspect est développé dans la [Fig. 48](#).

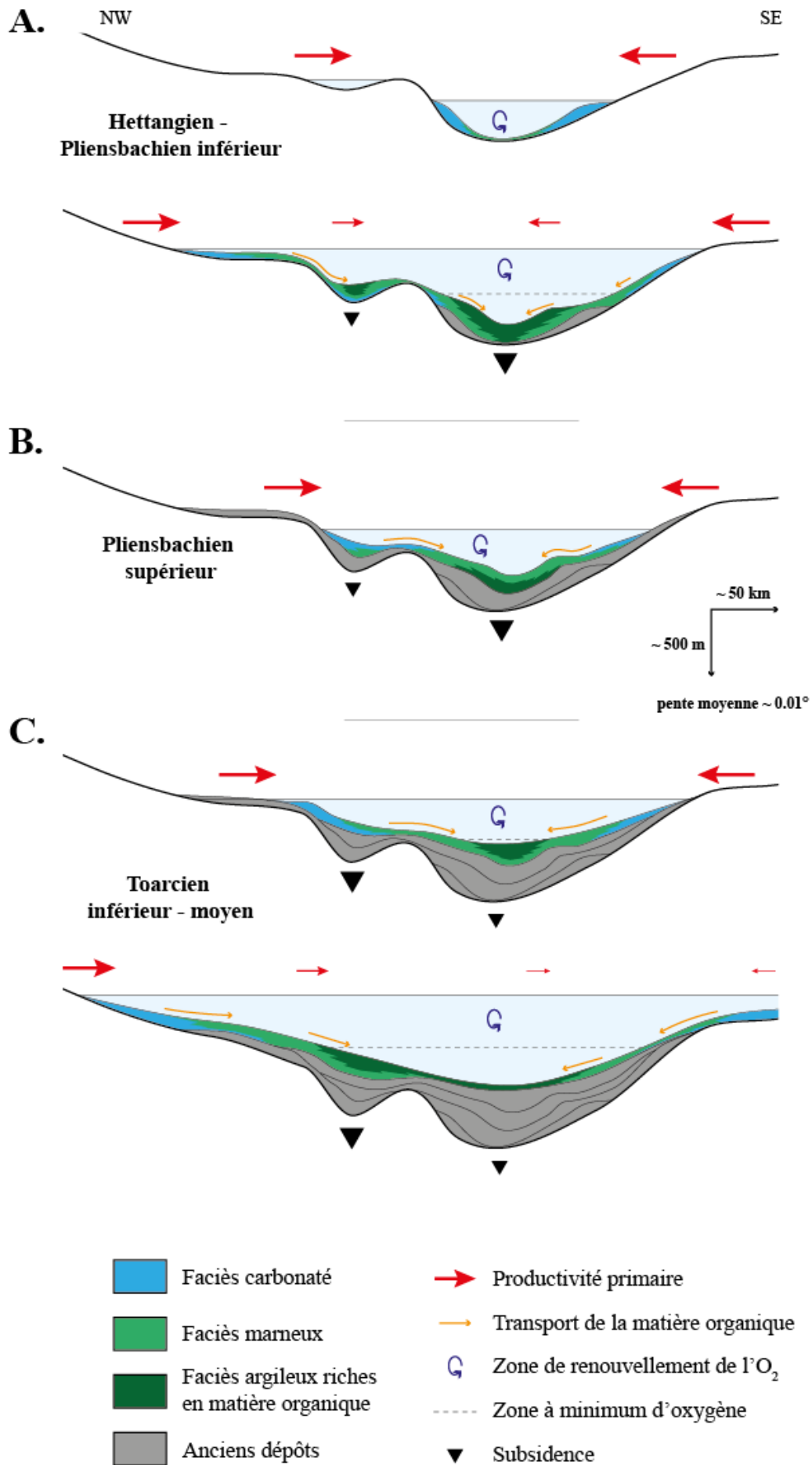


Fig. 48. *Modèle conceptuel récapitulant l'évolution d'un bassin épicontinental au Jurassique inférieur et les modalités de la mise en place de dépôts riches en matière organique.*

A : Début de la transgression liasique dès l'Hettangien, sur une topographie de fond irrégulière (similaire aux modèles de [Hallam et Bradshaw, 1979](#) et [Röhl et Schmid-Röhl, 2005](#)). La productivité primaire entraîne le développement d'une zone à minimum d'oxygène (similaire aux modèles de [Jenkyns, 1985](#) et [Fleet et al., 1987](#)). La matière organique sous forme d'agrégats organo-minéraux est transportée selon le même régime que les argiles, vers les zones subsidentes (équivalent aux modèles de [Hallam et Bradshaw, 1979](#) et [Jenkyns, 1985](#)). L'appauvrissement en oxygène se propage aux parties les plus profondes avec la transgression car le renouvellement en oxygène est limité sans circulation profonde (similaire aux modèles de [Wignall, 1991](#) et [Röhl et Schmid-Röhl, 2005](#)). Les dépressions dans la topographie peuvent entraîner l'accumulation de niveaux fins riches en matière organique dans les parties plus proximales du bassin (distribution comparable aux modèles de [Jenkyns, 1985](#) et [Fleet et al., 1987](#)) ;

B : La période régressive à la fin du Pliensbachien, entraîne la ré-oxygénation du bassin (équivalent aux modèles de [Wignall, 1991](#) et [Röhl et Schmid-Röhl, 2005](#)). La matière organique continue d'être transportée dans les parties subsidentes, mais elle n'est pas conservée.

C : La transgression reprend à la fin du Pliensbachien. La zone à minimum d'oxygène est à nouveau générée. L'invasion marine des terres émergées contribue à augmenter la distance à la côte des zones les plus profondes. Les dépocentres migrent vers les zones subsidentes plus proximales où les particules argileuses et la matière organique s'accumulent. L'ouverture de seuils n'entraîne pas le développement de circulation estuarienne car les bassins voisins présentent un régime similaire (équivalent au modèle de [Pompeckj, 1901](#)).

.4 Recommandations

Au vu des différents points abordés dans cette discussion générale, des améliorations pourraient être apportées dans la conception des équations et lois empiriques afin de mieux rendre compte des processus intervenant dans la distribution et les hétérogénéités de la matière organique. La plupart de ces recommandations est le fruit des recherches et discussions des membres du JIP (Joint Industry-Funded Project) DionisosFlow Organic-Rich Sediments. Certains de ces aspects sont en cours d'étude ou déjà en développement.

Il est également à noter que le module de simulation de la matière organique marine utilisé dans ces travaux de thèse, n'est que l'une des composantes de DionisosFlow Organic-Rich Sediments. Les modules de modélisation de la matière organique terrestre et lacustre sont en cours de développement. Certaines améliorations proposées ici font partie intégrante de la conception de ces modules (**Fig. 48**).

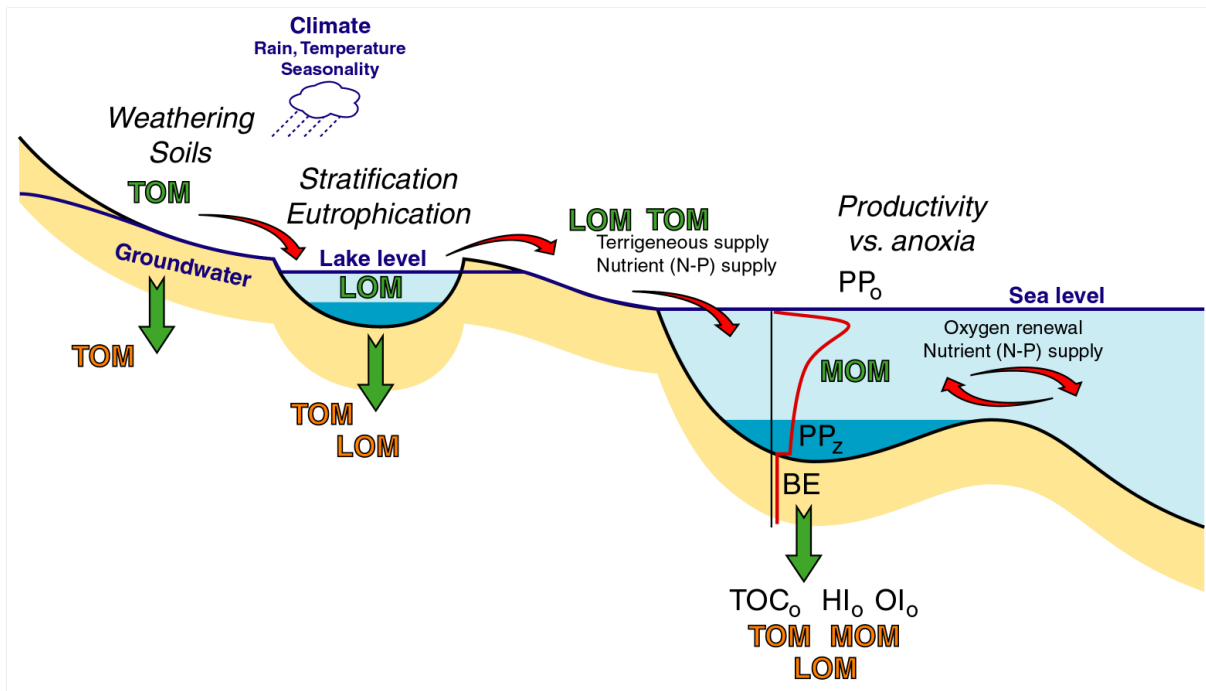


Fig. 48. Aperçu des processus pour la simulation de la matière organique dans DionisosFlow Organic-Rich Sediments (en cours de développement) (d'après [Chauveau, 2014](#)). TOM : matière organique terrestre ; LOM : matière organique lacustre ; MOM : matière organique marine ; PP : productivité primaire ; BE : efficacité d'enfouissement.

Productivité primaire :

Comme expliqué précédemment, la paléo-productivité primaire est un paramètre difficilement déterminable. Le choix est donc laissé à l'utilisateur dans la façon de la modéliser. Plutôt que de définir une loi fonction de la distance à la côte, les futurs développements devraient permettre de modéliser les apports de nutriments via la décharge fluviale. De plus la gestion des cellules d'upwelling et la mise en place de zones à minimum d'oxygène pourra se faire selon des conditions de bathymétrie et de niveau d'oxygénation définies par l'utilisateur.

Circulation océanique :

Une contrainte majeure réside dans l'impossibilité de modéliser la dynamique océanique qui influence le développement de la production primaire, le recyclage des nutriments vers la surface, le transport des particules, le niveau d'oxygénation, etc. Dans DionisosFlow, le transport des particules s'effectue sur le fond et ne peut être induit que par une force gravitaire ou un flux d'eau lui-même contrôlé par la gravité. Pourtant les études citées précédemment ont montré l'influence des processus de resuspension et de transport dans les couches néphéloïdes des agrégats organo-minéraux. Par ailleurs, les apports de nutriments et de matière organique terrestre depuis le continent peuvent également être influencés par les courants de surface, modifiant d'autant la productivité primaire. Ces aspects sont néanmoins compliqués à implémenter sans rendre démesurés les temps de calcul des modélisations. Le projet [MERLIN+](#) développé par CGG, par exemple, permet le calcul de la distribution de la matière organique à l'échelle globale à partir de modèle climatique. Cependant, l'évolution de la morphologie des bassins reste très limitée dans cette approche et les temps de calcul sont très largement supérieurs à ceux de DionisosFlow (i.e. plusieurs mois contre plusieurs jours pour les plus gros modèles DionisosFlow).

Niveau d'oxygène :

La topographie de fond a montré son influence sur la distribution de la matière organique au cours des différentes études. Outre cet impact, la physiographie générale du bassin peut contribuer à isoler certaines de ses parties et à modifier le réapprovisionnement de l'oxygène. Cet aspect est en cours de développement.

Par ailleurs, l'effet potentiel des événements gravitaires n'est pour l'instant pas évalué. L'arrivée massive de sédiments gorgés d'eau plus superficielle (et potentiellement plus riche en oxygène) dans les parties plus profondes des bassins a probablement une influence sur le niveau d'oxygénation.

Efficacité d'enfouissement :

La première étude a mis en évidence la potentielle lacune dans le calcul de l'efficacité d'enfouissement probablement liée à la présence de bioturbations. Le niveau d'oxygénation est un des paramètres principaux intervenant dans le calcul de l'efficacité d'enfouissement. Or, la présence d'organismes fouisseurs implique la remise en contact de la matière organique enfouie dans le sédiment avec un milieu potentiellement plus oxygéné. Par ailleurs, le type de lithologie n'est également pas pris en considération.

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Conclusion

Les roches mères pétrolières marines présentent des hétérogénéités tant dans leur répartition que dans leur composition en fonction du temps et de l'espace. Le dépôt de ces sédiments plus ou moins riches en matière organique et leurs variations sont des phénomènes complexes résultant de la convergence de plusieurs processus. Ces facteurs de contrôle ont fait l'objet de nombreuses études, mais le débat sur leur rôle relatif et leurs impacts reste le grand enjeu de cette thématique. Le contexte général et l'histoire des bassins font du Jurassique inférieur d'Europe un cas idéal pour caractériser les processus à l'origine des dépôts riches en matière organique et de leurs variabilités.

Ces travaux de thèse ont permis d'apporter une réflexion sur la matière organique marine, sa distribution, ses hétérogénéités et leur évolution dans le temps et l'espace. Cette réflexion est élaborée à partir de l'étude, de la caractérisation et de la quantification relative des facteurs de contrôle grâce à une approche naturaliste couplée à la modélisation numérique 3D et à l'analyse statistique.

En regard des résultats et des discussions apportés par les différentes études présentées dans ce mémoire, un certain nombre de conclusions peut être proposé :

- (1) La modélisation numérique stratigraphique normale permet d'intégrer une grande quantité de données et de tester l'influence de nombreux processus interconnectés et avec de fortes rétroactions. Incorporer la simulation de l'histoire de la matière organique dans ce type de modèle permet de dresser un bilan de l'influence relative des différents processus sur sa distribution de manière efficace malgré les limites inhérentes à cette méthode.
- (2) La morphologie des bassins a un impact primordial tant sur la distribution que sur la conservation de la matière organique. Dans le cas des bassins épicontinentaux du Jurassique inférieur européen, l'impact de la topographie de fond, des pentes et de la bathymétrie joue un rôle capital dans la localisation des zones d'accumulation de la matière organique et dans le développement d'environnements anoxiques.
- (3) Si l'on considère que le transport des agrégats organo-minéraux a un comportement similaire à celui des argiles : l'influence relative de ce transport est très importante dans la distribution de la matière organique et est directement corrélée à la morphologie des bassins. Cela souligne l'importance des courants des couches néphéloïdes et de l'hydrodynamisme dans des environnements de rampe carbonatée à faible pente.
- (4) Les taux de sédimentation relativement faibles des plateformes carbonatées du Jurassique inférieur (de l'ordre de quelques dizaines de mètres par million d'années en moyenne) par rapport aux moyennes actuelles, contribuent aux fortes teneurs en matière organique. La dilution dans les sédiments de cette dernière est faible.

(5) L'effet relatif de la productivité primaire sur le niveau d'oxygénation est très important dans ce contexte de bassins à faible profondeur d'eau et sans circulation profonde. Les simulations numériques tendent à montrer que de faibles valeurs de productivité primaire comparées à celles actuelles ($\sim 175 \text{ gC.m}^{-2}.\text{an}^{-1}$) peuvent conduire au développement de l'anoxie.

(6) Les résultats des simulations numériques suggèrent qu'un forçage de l'anoxie par diminution de l'oxygène de référence ou du coefficient de mélange n'aurait pas entraîné une distribution de la matière organique équivalente à celle observée dans les données. Ce constat va à l'encontre d'une anoxie mondiale au Toarcien.

(7) De par l'influence des différents processus, l'accumulation de niveaux épais (jusqu'à une centaine de mètres) et riches en matière organique (jusqu'à 15 wt %) est associée à une sédimentation dominée par les argiles et se fait principalement dans les zones de dépocentre où le niveau d'oxygène est faible. Ces modalités sont réunies pendant les périodes transgressives mais aussi pendant les périodes régressives si les taux de subsidence restent suffisants pour une accumulation significative de sédiments dans les parties profondes des bassins.

(8) Les niveaux riches en matière organique suivent la migration des dépocentres pendant les périodes transgressives. Leur accumulation peut éventuellement se propager vers les parties plus proximales des bassins formant des « anneaux » riches en matière organique au niveau de la rupture de pente des rampes carbonatées.

(9) Des niveaux riches en matière organique mais plus fins (de plusieurs centimètres à quelques mètres) peuvent également se déposer dans les parties très proximales des bassins où au niveau des seuils en association avec une sédimentation plus grossière. Ces dépôts sont liés à des dépressions restreintes dans la topographie de la rampe carbonatée liées à une subsidence et/ou à des apports clastiques différentiels.

Finalement, cette approche intégrée apporte de nouveaux éléments dans le débat portant sur le rôle relatif des processus sur la distribution et les hétérogénéités de la matière organique. L'impact primordial de la morphologie des bassins mis en avant par ces travaux va à l'encontre de la littérature majoritaire dans laquelle la production et la conservation de la matière organique occultent les autres facteurs. Ces deux processus jouent à l'évidence un rôle important sur la distribution des niveaux riches, mais leurs modalités sont entièrement dépendantes de la morphologie des bassins. L'ensemble de ces travaux met en avant la nécessité d'élargir le débat pour une meilleure compréhension de la distribution globale des roches mères.

Perspectives

A l'issue de ces trois années de recherche, il apparaît qu'un certain nombre d'éléments permettrait d'approfondir ces travaux de thèse :

- (1) La bathymétrie et le taux de sédimentation ont été gardés invariants afin de conserver la calibration des méta-modèles qui ont servis de support à l'analyse statistique de sensibilité globale afin de déterminer l'effet relatif des paramètres critiques. Or, ces deux paramètres ont un effet important sur la distribution de la matière organique. La même approche pourrait être menée sur des cas d'études présentant des bathymétries et des taux de sédimentations différents afin de quantifier précisément leur effet relatif.
- (2) De la même manière, cette approche pourrait être employée à partir des données de zone d'upwelling afin de mettre en regard les résultats d'études où la morphologie du bassin et les modalités de la production primaire sont foncièrement différentes.
- (3) Les analyses de Diffraction des Rayons-X (DRX) effectuées ont permis de mettre en évidence de manière descriptive les relations entre lithologie et matière organique au travers de l'approche naturaliste et de modélisation numérique. Une étude plus poussée au travers de nouvelles modélisations où de celles déjà effectuées, permettrait de définir les zones d'intérêts dans le cadre de l'exploitation non-conventionnelle où les teneurs en matière organique sont significatives et où la minéralogie est propice à la fracturation.
- (4) L'approche de modélisation stratigraphique normale développée pendant ces travaux permet de simuler la distribution de la matière organique après les premiers mètres d'enfouissement (i.e. diagenèse précoce). Un projet d'étude ENGIE est programmé afin de tester la maturation des roches mères après un enfouissement plus profond (logiciel ThemisFlow) à partir de la distribution des TOC initiaux et des lithologies simulés dans le modèle DionisosFlow du bassin de Paris.
- (5) Enfin, ces travaux ont souligné les limites des équations et lois empiriques utilisées pour simuler les processus intervenant dans l'histoire de la matière organique. D'avantage de travaux descriptifs et expérimentaux interdisciplinaires entre sédimentologues et océanographes permettraient assurément d'améliorer ces équations et d'apporter une meilleure compréhension des processus mis en jeu et de leurs interactions.

BIBLIOGRAPHIE

- AINSWORTH, N. R., BRAHAM, W., GREGORY, F. J., JOHNSON, B., KING, C., 1998. The lithostratigraphy of the latest Triassic to earliest Cretaceous of the English Channel and its adjacent areas. In: *Development, Evolution and Petroleum Geology of the Wessex Basin*, (Ed. by Underhill, J. R.), Geological Society, London, Special Publications, **133**, 103–164.
- ALLER, R. C., 2001. Transport and reactions in the bioirrigated zone. In: *The Benthic Boundary Layer* (Ed. by Boudreau, B.P., Jørgensen, B.B.), Oxford University Press, 269–30.
- ALLER, R.C., BLAIR, N.E., 2006. Carbon remineralization in the Amazon-Guianas tropical mobile mudbelt: A sedimentary incinerator. *Continental Shelf Research*, **26**, 2241–2259.
- ALPERN, B., CHEYMOL, D., 1978. Réflectance et fluorescence des organoclastes du Toarcien du Bassin de Paris en fonction de la profondeur et de la température. *Rev. Inst. Fr. Pét.*, **33**, 515–335.
- ALVES, T.M., GAWTHORPE, R.L., HUNT, D.W., MONTEIRO, J.H., 2002. Jurassic tectono-sedimentary evolution of the Northern Lusitanian Basin (offshore Portugal). *Marine and Petroleum Geology*, **19**, 727–754.
- ALVES, T.M., GAWTHORPE, R.L., HUNT, D.W., MONTEIRO, J.H., 2003. Post-Jurassic tectono-sedimentary evolution of the Northern Lusitanian Basin (Western Iberian margin). *Basin Res.*, **15**, 227–249.
- ALVES, T.M., MOITA, C., SANDNES, F., CUNHA, T., MONTEIRO, J.H., PINHEIRO, M., 2006. Mesozoic-Cenozoic evolution of North Atlantic continental-slope basins: the Peniche basin, western Iberian margin. *Am. Assoc. Petrol. Geol. Bull.*, **90**, 31–60.
- ALVES, T.M., MOITA, C., CUNHA, T., ULLNAESS, M., MYKLEBUST, R., MONTEIRO, J.H., MANUPPELLA, G., 2009. Diachronous evolution of Late Jurassic-Cretaceous continental rifting in the northeast Atlantic (west Iberian margin). *Tectonics*, **28**, 1–32.
- ALZAGA-RUIZ, H., GRANJEON, D., LOPEZ, M., SERANNE, M., ROURE, F., 2009. Gravitational collapse and Neogene sediment transfer across the western margin of the Gulf of Mexico: insights from numerical models. *Tectonophysics*, **470**, 21–41.
- ARTHUR, M.A., SAGEMAN, B.R., 2005. Sea-level control on source-rock development: perspectives from the Holocene Black-Sea, The Mid-Cretaceous Western Interior Basin of North America, and the Devonian Appalachian Basin. In: *The deposition of Organic-Carbon-Rich sediments: Models, Mechanisms and Consequences* (Ed. by Harris, N.), SEPM Special Publication, **82**, 35–59.
- ARTHUR, M.A., DEAN, W.E., STOW, D.A.V., 1984. Models for the deposition of Mesozoic-Cenozoic fine grained organic-rich sediments in the deep sea. In: *Fine grained sediments: deep sea processes and facies* (Ed. by Stow, D.A.V., Piper, D.J.W.), Geological society (London), Oxford Blackwell Scientific, special Publication, **14**, 527–560.
- AZERÊDO, A.C., WRIGHT, P., RAMALHO, R., 2002. The Middle- -Late Jurassic forced regression and disconformity in central Portugal: eustatic, tectonic and climatic effects on a carbonate ramp system. *Sedimentology*, **49**, 1339–1370.
- AZERÊDO, A.C., DUARTE, L.V., HENRIQUES, M.H., MANUPPELLA, G., 2003. Da dinâmica continental no Triásico aos mares do Jurássico Inferior e Médio. *Cadernos de Geologia de Portugal*. Instituto Geológico e Mineiro, Lisbon. 43 p.
- BAILEY, T.R., ROSENTHAL, Y., MCARTHUR, J.M., VAN DE SCHOOTBRUGGE, B., THIRLWALL, M.F., 2003. Paleocceanographic changes of the Late Pliensbachian-Early Toarcian interval: a possible link to the genesis of an Oceanic Anoxic Event. *Earth planet science letter*, **212**, 307–320.
- BASSOULET, J.P., BAUDIN, F., 1994. Le Toarcien inférieur: un épisode de crise dans les bassins et sur les plates-formes carbonatées de l'Europe du Nord-Ouest et de la Téthys. *Geobios Memoire Spécial*, **17**, 645–654.
- BASSOULET, J.P., ELMI, S., POISSON, A., CECCA, F., BELLION, Y., GUIRAUD, R., BAUDIN, F., 1993. Middle Toarcian (184–182 Ma). In: *Atlas Tethys Palaeoenvironmental Maps* (Ed. by Dercourt, J., Ricou, L.E., Vrielynck, B.), Gauthier-Villards, Paris.
- BASTVIKEN, D., PERSSON, L., ODHAM, G., TRANVIK, L., 2004. Degradation of dissolved organic matter in oxic and anoxic lake water. *Limnology Oceanography*, **49**, 109–116.
- BAUDIN, F., 1989. Caractérisation géochimique et sédimentologique de la matière organique du Toarcien téthysien (Méditerranée, Moyen-Orient), significations paléogéographiques. Thèse Université Pierre et Marie Curie, Paris, France, 246 p.
- BAUDIN, F., 1995. Depositional Controls on Mesozoic Source Rocks in the Tethys. In: *Paleogeography, Paleoclimate, and Source Rocks* (Ed. by Huc, A.Y.), American Association of Petroleum Geologists Studies in Geology, **40**, 191–211.
- BAUDIN, F., HERBIN, J.P., VANDENBROUCKE, M., 1990. Mapping and geochemical characterization of the Toarcian organic matter in the Mediterranean Tethys and Middle East. *Organic Geochemistry*, **16**, 677–687.
- BAUDIN, F., TRIBOVILLARD, N., TRICHET, J., 2007. *Géologie de la matière organique*. (Ed. by Vuibert), Société Géologique de France, 263 p.
- BEAULIEU, S.E., 2003. Resuspension of phytodetritus from sea floor: a laboratory flume study. *Limno. Oceanogra.*, **48**, 1235–1244.

- BEHAR, F., BEAUMONT, V., DE B. PENTEADO, H.L., 2001. Rock-Eval 6 Technology: Performances and Developments. Oil & Gas Science and Technology. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, **56**, 111–134.
- BENEDICTO, A., LABAUME, P., SÉGURET, M., SERANNE M., 1996. Low-angle crustal ramp and basin geometry in the Gulf of Lion passive margin: Oligocene-Aquitainian Vistrenque graben, SE France. *Tectonics*, **15**, 1192–1212.
- BERELSON, W.M., 2001. The Flux of Particulate Organic Carbon Into the Ocean Interior: a comparison of Four U.S. JGOFS Regional Studies. *Oceanography*, **14**, 59–67.
- BERGER, W.H., FISCHER, K., LAI, C., WU, G., 1988. Ocean carbon flux: maps of primary production and export production. In: *Biogeochemical Cycling and Fluxes Between the Deep Euphotic Zone and Other Oceanic Realms* (Ed. by Agegian, C.R.), NOAA, Washington, DC, 131–176.
- BERGER, W.H., SMETACEK, V.S., WEFER, G., 1989. Productivity of the Ocean: Present and Past. In: *Dahlem Workshop Report* (Ed. by Berger W.H., Smetacek V.S., Wefer G.), Berlin. Life Sciences Research Report, **44**, 1–34.
- BERNER, A., 1991. Model for atmospheric CO₂ over Phanerozoic time. *American Journal of Science*, **291**, 339–376.
- BERNOULLI, D., JENKYNS, H.C., 1974. Alpine, Mediterranean and central Atlantic Mesozoic facies in relation to the early evolution of the Tethys. In: *Modern and Ancient Geosynclinal Sedimentation* (Ed. by Dott, R.H., Shaver R.H.), Spec. Publ. Soc. econ. Paleont. Miner., **19**, 129–160.
- BESSEREAU, G., HUC, A.Y., CARPENTIER, B., 1992. Distribution of organic matter in the Liassic series of the Paris basin: an exemple of organic heterogeneity in a source rock interval. In: *Generation, accumulation and production of Europe's hydrocarbons II* (Ed. by Spencer A.M.), Springer, Berlin Heidelberg New York, 69–87.
- BESSEREAU, G., GUILLOCHEAU, F., HUC, A.Y., 1995. Source rock occurrence in a sequence stratigraphic framework: the example of the Lias of the Paris Basin. In: *Paleogeography, Paleoclimate, and Source Rocks* (Ed. by Huc A.Y.), Am. Assoc. Petrol. Geol. Mem., **40**, 273–301.
- BETTS, J.N., HOLLAND, H.D., 1991. The oxygen content of ocean bottom waters, the burial efficiency of organic carbon, and the regulation of atmospheric oxygen. *Global Planet. Change*, **97**, 5–18.
- BISHOP, J.K.B., 1989. Regional extremes in particulate matter composition and flux: effects on the chemistry of the ocean interior. In: *Productivity of the Ocean: Present and Past* (Ed. by Berger, H., Smetacek, V.S., Wefer, G.), 117–137.
- BJERRUM, C.J., SURLYK, F., CALLOMON, J.H., SLIGNERLAND, R.L., 2001. Numerical paleoceanographic study of the Early Jurassic Transcontinental Laurasian Seaway. *Paleoceanography*, **16**, 390–404.
- BLEICHER, G., 1883. Le minerai de fer de Lorraine (Lias supérieur et oolithe inférieur) au point de vue stratigraphique et paléontologique. *Bulletin Société Géologique de France*, **12**, 55–62.
- BODIN, S., FRÖHLICH, S., BOUTIB, L., LAHSINI, S., REDFERN, J., 2011. Early Toarcian source rock potential in the Central High Atlas Basin (Central Morocco): Regional distribution and depositional model. *Journal of Petroleum Geology*, **34**, 345–364.
- BOULILA, S., GALBRUN, B., HURET, E., HINNOV, L.A., ROUGET, I., GARDIN, S., BARTOLINI, A., 2014. Astronomical calibration of the Toarcian Stage: Implications for sequence stratigraphy and duration of the early Toarcian OAE. *Earth and Planetary Science Letters*, **386**, 98–111.
- BOWN, P., LEES, J.A., YOUNG, J.R., 2004. Calcareous nannoplankton evolution and diversity through time. In: *Coccolithophores: from molecular processes to global impact* (Ed. Thierstein, H.R., Young, J.R.), Springer Verlag, Berlin, 481–501.
- BOYER, T.P., ANTONOV, J.I., BARANOVA, O.K., GARCIA, H.E., JOHNSON, D.R., LOCARNINI, R.A., MISHONOV, A.V., SEIDOV, D., SMOLYAR, I.V., ZWENG M.M., 2009. *World Ocean Database 2009* [DVDs], NOAA Atlas NESDIS (Ed. by Levitus, S.), U.S. Govt. Print. Off., Washington, D. C., **66**, 216 p.
- BRUNEAU, B., CHAUVEAU, B., DUARTE, L.V., DESAUBLIAUX, G., MORETTI, I., BAUDIN, F., 2016a. 3D Numerical Modelling of Marine Organic Matter Distribution: example of the Early Jurassic sequences of the Lusitanian Basin (Portugal). *Basin Research*, in press, 1–23, doi: 10.1111/bre.12210.
- BRUNEAU, B., CHAUVEAU, B., BAUDIN, F., MORETTI, I., 2016b. 3D stratigraphic forward numerical modelling approach for prediction of organic-rich deposits and their heterogeneities. *Marine and Petroleum Geology*, submitted.
- BRUNEAU, B., BAUDIN, F., MORETTI, I., 2016c. Palynofaciès du Toarcien inférieur du forage de Couy-Sancerre (Cher, bassin de Paris). *Geology de la France*, in prep.
- BRUNEAU, B., VILLIER, M., DUCROS, M., CHAUVEAU, B., BAUDIN, F., MORETTI, I., 2016d. 3D numerical modelling to close down the preservation versus productivity controversy. A case study from the Toarcian of the Paris Basin. in prep.
- BUCHANAN, J. G., 1998. The exploration history and controls on hydrocarbon prospectivity in the Wessex basins, southern England, UK. In: *Development, Evolution and Petroleum Geology of the Wessex Basin*, (Ed. by Underhill, J.R.), Geological Society, London, Special Publications, **133**, 19–37.
- BURCHETTE, T.P., WRIGHT, V.P., 1992. Carbonate ramp depositional systems. *Sedimentary Geology*, **79**, 3–57.
- BURDIGE, D.J., 2007. Preservation of Organic Matter in Marine Sediments: Controls, Mechanisms, and an Imbalance in Sediment Organic Carbon Budgets? *Chem. Rev.*, **107**, 467–485.
- BUTLER, M., 1998. The geological history of the southern Wessex Basin - a review of new information from oil exploration. *Geological Society Special Publication*, **133**, 67–86.

- CANFIELD, D.E., 1994. Factors influencing organic carbon preservation in marine sediments. *Chemical Geology*, **114**, 315–329.
- CARPENTIER, B., HUC, A.Y., BESSEREAU, G., 1991. Wireline logging and source rocks – Estimation of organic carbon content by the Carbolog method. *The log Analyst*, **32**, 279–297.
- CARPENTIER, B., HUC, A.Y., GUILHAUMOU, N., 1993. Geological and geochemical modeling, an approach for understanding organic cyclic sedimentation in evaporitic sequences. Application to the Mulhouse Basin (France). *Organic Geochemistry*, **20**, 1153–1164.
- CERLING, T. E., 1991. Carbon dioxide in the atmosphere: evidence from Cenozoic and Mesozoic paleosols. *American Journal of Science*, **291**, 377–400.
- CHANDLER, M.A., RIND, D., RUEDY, R., 1992. Pangaeen climate during the Early Jurassic: GCM simulations and the sedimentary record of paleoclimate. *Geological Society of America Bulletin*, **104**, 543–559.
- CHAUVEAU, B., 2014. *Dionisos Organic Rich Sediments - Introduction*. JIP-DORS meeting 2014. Personal communication.
- CHAUVEAU, B., 2015. *Dionisos Organic Rich Sediments*. JIP-DORS meeting 2015. Personal communication.
- CHAUVEAU, B., 2016. *Dionisos Organic Rich Sediments*. JIP-DORS meeting 2016. Personal communication.
- COHEN, A.S., COE, A.L., HARDING, S.M., SCHWARK, L., 2004. Osmium isotope evidence for the regulation of atmospheric CO₂ by continental weathering. *Geology*, **32**, 157–160.
- COHEN, K.M., FINNEY, S.C., GIBBARD P.L., FAN, J.X., 2015. *Chart v2015/01*. International Commission on Stratigraphy, 1 chart.
- COMAS-RENGIFO, M.J., DUARTE, L.V., GOY, A., PAREDES, R., SILVA, R.L., 2013. El Sinemuriense Superior (cronozonas Oxynotum y Raricostatum) en la región de S. Pedro de Moel (Cuenca Lusitánica, Portugal). Fácies carbonatadas ricas em matéria orgânica do Jurássico da Bacia Lusitânica. Novos contributos paleontológicos, sedimentológicos e geoquímicos. *Comunicações Geológicas*, **100**, 15–19.
- COMBAZ, A., 1964. Les palynofaciès. *Rev. Micropaléontol.*, **7**, 205–218.
- COMBAZ, A., 1980. Les kérogènes vus au microscope. In: *Kerogen – Insoluble Organic Matter from Sedimentary Rocks* (Ed. by Durand, B.), Technip, Paris, 57–111.
- COURTILLOT, V.E., RENNEB, P.R., 2003. On the ages of flood basalt events. *Geodynamics. C. R. Geoscience*, **335**, 113–140.
- CSATO, I., GRANJEON, D., CATUNEANU, O., BAUM, G.R., 2013. Athree-dimensional stratigraphicmodel for the Messinian crisis in the Pannonian Basin, eastern Hungary. *Basin Research*, **25**, 121–148.
- CULLING, W., 1960. Analytical theory of erosion. *J. Geol.*, **68**, 366–344.
- DEAN, W.E., ARTHUR, M.A., STOW, D.A.V., HUC, A.Y., 1984. Diagenetic patterns in Atlantic Cretaceous black shales and multicolored claystones with emphasis on DSDP Site 530, Southern Angola basin. In: *Initial Reports DSDP 75* (Ed. by Hay, W.W., Sibuet, J.C.), 819–844.
- DECONINCK, J.F., HESSELBO, S.P., DEBUISSER, N., AVERBUCH, O., BAUDIN, F., BESSA, J., 2003. Environmental controls on clay mineralogy of an Early Jurassic mudrock (Blue Lias Formation, southern England). *International Journal of Earth Sciences*, **92**, 255–266.
- DELAVENNA, M.F., 1990. *Le Jurassique du forage de Sancerre-Couy (Programme Géologie profonde de la France, Cher) : minéralogie, propriétés physiques et matière organique*. Thèse en Science, Orsay : 133 p.
- DELAVENNA, M.F., STEINBERG, M., TRAUTH, N., HOLTZAPFFEL, T., 1989. Influence des cycles eustatiques et de la tectonique synsédimentaire sur la minéralogie du Lias et du Dogger du forage de Sancerre-Couy (Cher). Programme Géologie profonde de la France. *C. R. Acad. Sci. Paris*, **308**, 111–116.
- DELMAS, J., HOUEL, P., VIALLY, R., 2002. *Paris Basin Petroleum Potential*. Rapport regional d'évaluation pétrolière, Institut Français du Pétrole, 179 p.
- DEMAISON, G., MOORE, G.T., 1980. Anoxic environment and oil source bed genesis. *AAPG Bulletin*, **64**, 1179–1209.
- DERA, G., PUCÉAT, E., PELLENNARD, P., NEIGE, P., DELSATE, D., JOACHIMSKI, M.M., REISBERG, L., MARTINEZ, M., 2009. Water mass exchange and variations in seawater temperature in the NW Tethys during the Early Jurassic: Evidence from neodymium and oxygen isotopes of fish teeth and belemnites. *Earth and Planetary Science Letters*, **286**, 198–207.
- DERA, G., BRIGAUD, B., MONNA, F., LAFFONT, R., PUCEAT, E., DECONINCK, J-F., PELLENNARD, P., JOACHIMSKI, M.M., DURLET, C., 2011. Climatic ups and downs in a disturbed Jurassic world. *Geology*, **39**, 215–21.
- DERA, G., PRUNIER, J., SMITH, P.L., HAGGART, J.W., POPOV, E., GUZHOV, A., ROGOV, M., DELSATE, D., THIES, D., CUNY, G., PUCEAT, E., CHARBONNIER, G., BAYON, G., 2015. Nd isotope constraints on ocean circulation, paleoclimate, and continental drainage during the Jurassic breakup of Pangea. *Gondwana Research*, **27**, 1599–1615.
- DISNAR, J. R., LE STRAT, P., FARJANEL, G., FIKRI, A., 1996. Sedimentation de la matière organique dans le nord-est du Bassin de Paris : conséquences sur le dépôt des argilites carbonées du Toarcien inférieur. *Chemical Geology*, **131**, 15–35.

- DROMART, G., ALLEMAND, P., GARCIA, J.P., ROBIN, C., 1996. Variation cyclique de la production carbonatée au Jurassique le long d'un transect Bourgogne-Ardèche, Est-France. *Bulletin de la Société Géologique de France*, **167**, 423–433.
- DROMART, D., GARCIA, J.-P., GAUMET, F., PICARD, S., ROUSSEAU, M., ATROPS, F., LECUYER, L., SHEPPARD, S.M.F., 2003. Perturbation of the carbon cycle at the Middle/Late Jurassic transition: Geological and geochemical evidence. *American Journal of Science*, **303**, 667–707.
- DUARTE, L.V., 1997. Facies analysis and sequential evolution of the Toarcian-Lower Aalenian series in the Lusitanian Basin (Portugal). *Comunicações do Instituto Geológico e Mineiro*, **83**, 65–94.
- DUARTE, L.V., 2007. Lithostratigraphy, sequence stratigraphy and depositional setting of the Pliensbachian and Toarcian series in the Lusitanian Basin (Portugal). In: *The Peniche Section (Portugal), Contributions to the Definition of the Toarcian GSSP* (Ed. by Rocha, R.B.), International Subcommission on Jurassic Stratigraphy, Lisbon, 17–23.
- DUARTE, L.V., SOARES, A.F., 2002. Litostratigrafia das séries margo-calcárias do Jurássico Inferior da Bacia Lusitânica (Portugal). *Comunicações do Instituto Geológico e Mineiro*, **89**, 135–154.
- DUARTE, L.V., WRIGHT, V.P., FERNANDEZ-LOPEZ, S., ELMI, S., KRAUTTER, M., AZEREDO, A.C., HENRIQUES, M.H., RODRIGUES, R., PERILLI, N., 2004. Early Jurassic carbonate evolution in the Lusitanian Basin: facies, sequence stratigraphy and cyclicity. In: *Carboniferous and Jurassic Carbonate Platforms of Iberia* (Ed. by Duarte, L.V., Henriques, M.H.), 23rd IAS Meeting of Sedimentology, Coimbra 2004, Field Trip Guide Book, **1**, 45–71.
- DUARTE, L.V., OLIVEIRA, L.C.V., COMAS-RENGIFO, M.J., SILVA, F., SILVA, R.L., 2010. Organic-Rich facies in the Sinemurian and Pliensbachian of the Lusitanian Basin, Portugal: Total organic carbon distribution and relation to transgressive-regressive facies cycles. *Geologica Acta*, **8**, 325–340.
- DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA FILHO, J.G., RIBEIRO, N.P., CHAGAS, R.B.A., 2012. High-resolution stratigraphy, palynofacies and source rock potential of the Agua de Madeiros formation (lower Jurassic), Lusitanian basin, Portugal. *Journal of Petroleum Geology*, **35**, 105–126.
- DUARTE, L.V., COMAS-RENGIFO, M.J., SILVA, R.L., PAREDES, R., GOY, A., 2014a. Carbon isotope stratigraphy and ammonite biostratigraphy across the Sinemurian-Pliensbachian boundary in the western Iberian margin. *Bulletin of Geosciences*, **89**, 719–736.
- DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA FILHO, J.G., AZEREDO, A.C., CABRAL, M.C., COMAS-RENGIFO, M.J., CORREIA, G., FERREIRA, R., LOUREIRO, I.M., PAREDES, R., PEREIRA, A., RIBEIRO, N.P., 2014b. Advances in the Stratigraphy and Geochemistry of the Organic-Rich Lower Jurassic Series of the Lusitanian Basin (Portugal). In: *STRATI 2013* (Ed. By Rocha, R.B., Pais, J., Kullberg, J.C., Finney, S.) Springer Geol., 841–846.
- DUNCAN, R.A., HOOPER, P.R., REHACEK, J., MARSH, J.S., DUNCAN, A.R., 1997. The timing and duration of the Karoo igneous event, southern Gondwana. *Journal of Geophysical Research*, **102**, 127–138.
- DURAND, B., ESPITALIÉ, J., NICAISE, G., COMBAZ, A., 1972. Etude de la matière organique insoluble (kérogène) des argilles du Toarcien du Bassin de Paris. Première partie: étude par les procédés optiques, analyse élémentaire, étude en microscopie et microdiffraction électroniques. *Rev. Inst. Ft. Pét.*, **28**, 865–884.
- ELMI, S., 2005. Toarcian Working Group 2005 Report and prospects. In: *The Peniche section (Portugal). Candidate to the Toarcian Global Stratotype Section and Point (GSSP)* (Ed. by Elmi, S., Duarte, L.V., Mouterde, R., Rocha, R.B., Soares A.F.), Caparica, 2–10.
- ENAY, R., MANGOLD, C., 1980. *Synthèse paléogéographique du Jurassique Français par Le Groupe français d'Etude du Jurassique*. (Coord. by Cariou, E., Contini, D., Debrand-Passard, S., Donze, P., Gabilly, J., Lefavrais-Raymond, A., Mouterde, R., Thierry, J.), Docum. Lab. Géol. Lyon, H.S. 5, 210 p., 1 fig., 3 tabl., 42 cartes.
- ERBA, E., 2004. Calcareous nannofossils and Mesozoic oceanic anoxic events. *Marine micropaleontology*, **52**, 85–106.
- ERBA, E., 2006. The first 150 million years history of calcareous nannoplankton: Biosphere/geosphere interactions. *Palaeogeography palaeoclimatology palaeoecology*, **232**, 237–250.
- ESPITALIÉ, J., LAPORTE, L.J., MADEC, M., MARQUIS, F., LEPLAT, P., PAULET, J., BOUTEFEU, A., 1977. Méthode rapide de caractérisation des roches mères, de leur potentiel pétrolier et de leur degré d'évolution. *Rev. Inst. Franc. Pétrole*, **32**, 32–42.
- ESPITALIÉ, J., DEROO, G., MARQUIS, F., 1985. La pyrolyse Rock-Eval et ses applications. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, **40**, 563–579.
- ESPITALIÉ, J., MARQUIS, F., SAGE, F., BARSONY, I., 1987. Géochimie organique du Bassin de Paris. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, **42**, 271–302.
- FALKOWSKI, P.G., RAVEN, J.A., 2007. *Aquatic Photosynthesis*, 2nd edn. Malden: Blackwell Science, 488 p.
- FARRIMOND, P., EGLINTON, G., BRASSEL, S.C., JENKINS, H.C., 1989. Toarcian anoxic event in Europe: An organic geochemical study. *Marine and Petroleum Geology*, **6**, 136–147.
- FERREIRA, R., MENDONÇA FILHO, J.G., DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA, J.O., 2010a. Variação organofaciológica na sucessão rica em matéria orgânica do Pliensbachiano de Peniche (Bacia Lusitânica, Portugal). In: *Actas X Congresso de Geoquímica dos Países de Língua Portuguesa/XVI Semana de Geoquímica* (Ed. by Flores D., Marques M.), Memórias, **14**, Porto, 301–308.

- FERREIRA, R., MENDONÇA FILHO, J.G., DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA, J.O., 2010b. Hydrocarbon generation potential of the Pliensbachian organic-rich series of Peniche (Lusitanian Basin, Portugal): An organopetrographic and thermal maturation assessment integrated analysis. In: *II Central & North Atlantic Conjugate Margins Conference* (Ed. by Pena Dos Reis, R., Pimentel, N.), Ext. Abstr., **3**, Lisbon, 116–120.
- FELIX, M., 2014. A comparison of equations commonly used to calculate organic carbon content and marine palaeoproductivity from sediment data. *Marine Geology*, **347**, 1–11.
- FITZWATER, S.E., KNAUER, G.A., MARTIN, J.H., 1982. Metal contamination and its effect on primary production measurements. *Limnology Oceanography*, **27**, 544–551.
- FLEET, A. J., CLAYTON, C. J., JENKINS, H. C., PARKINSON, D. N., 1987. Liassic source rock deposition in Western Europe. In: *Petroleum Geology of North West Europe* (Ed. by Brooks, Glennie), 59–70.
- FRIMMEL, A., OSCHMANN, W., SCHWARK, L., 2004. Chemostratigraphy of the Posidonia Black Shale, SW Germany: I. Influence of sea-level variation on organic facies evolution. *Chemical Geology*, **206**, 199–230.
- GALBRUN, B., DALY, L., 1987. Établissement d'un pôle paléomagnétique pour la plate-forme européenne stable à l'époque toarcienne. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences*, **2**, 773–776.
- GALBRUN, B., GABILLY, J., RASPLUS, L., 1988. Magnetostratigraphy of the Toarcian stratotype sections at Thouars and Airvault (Deux-Sèvres, France). *Earth planetary science letter*, **87**, 453–462.
- GALBRUN, B., BAUDIN, F., BASSOULET, J.P., DEPECHE, F., EMMANUEL, L., LACHKAR, G., RENARD, M., RIVELINE, J., GABILLY, J., HANTZPERGUE, P., MANIVIT, H., RUGET, C., 1994. Stratigraphie intégrée du Toarcien stratotypique (coupes de Thouars et Airvault, Deux-Sèvres, France). *Geobios Mémoire spécial*, **17**, 575–95.
- GALLOIS, R.W., PAUL, C.R.C., 2009. Lateral variations in the topmost part of the Blue Lias and basal Charmouth Mudstone formations (Lower Jurassic) on the Devon and Dorset coast. *Geoscience in South-West England*, **12**, 125–133.
- GARRETT, C., 1991. Marginal mixing theories. *Atmosphere Ocean*, **29**(2), 313–339.
- GARVINE, R.W., 1973. The Effect of Bathymetry on the Coastal Upwelling of Homogeneous Water. *Journal of Physical Oceanography*, **3**, 47–56.
- GÉLY, J.P., LORENZ, J., 1991. Analyse Séquentielle du Jurassique (Hettangien ~ Callovien) du sondage de Couy (Bassin Parisien). *C. R. Acad. Sci. Paris*, **313**, 347–353.
- GÉLY, J.P., HANOT, F., 2014. Coupe géologique du Bassin de Paris. In: *Le Bassin parisien, un nouveau regard sur la Géologie* (Ed. by Association des Géologues du bassin de Paris), 1 cross section.
- GOLDMAN, M.I., 1924. "Black Shale" Formation in and about Chesapeake Bay. *AAPG Bull.*, **8**, 195–201.
- GORIN, G.E., STEFFEN, D., 1991. Organic facies as a tool for recording eustatic variations in marine fine-grained carbonates – example of the Berriasian stratotype at Berrias (Ardèche, SE France). *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, **85**, 303–320.
- GOY, G., 1979. *Les « Schistes carton » (Toarcien inférieur) du Bassin de Paris en affleurements et en sondages. Étude par diagraphie, pétrographie, nannoflore calcaire, conditions de sédimentation*. Thèse Université Pierre et Marie Curie, Paris, France, 187 p.
- GRANJEON, D., 1996. Modélisation stratigraphique déterministe – conception et applications d'un modèle diffusif 3D multilithologique. Mémoires Geosciences Rennes, PhD Dissertation, Geosciences Rennes, Rennes, France.
- GRANJEON, D., 2009. 3D stratigraphic modeling of sedimentary basins. AAPG Search and Discovery Article #90090©2009 Am. Assoc. Petrol. Geol. Annual Convention, Denver, Colorado.
- GRANJEON, D., 2014. 3D forward modelling of the impact of sediment transport and base level cycles on continental margins and incised valleys. In: *From Depositional Systems to Sedimentary Succession on the Norwegian Continental Margin* (Ed. by Martinius, A.W., Ravnas, R., Howell, R.J., Steel, R.J., Wonham, J.P.) Spec. Publ. Int. Assoc. Sedimentol., **46**, 453–472.
- GRANJEON, D., CHAUVEAU, B., 2014. Sedimentary basin development method using stratigraphic simulation coupled with an organic matter production and degradation model. Brevet US20140163883 A1. 12-6-2014.
- GRANJEON, D., JOSEPH, P., 1999. Concepts and applications of a 3-D multiple lithology, diffusive model in stratigraphic modeling. In: *Numerical Experiments in Stratigraphy: Recent Advances in Stratigraphic and Sedimentologic Computer Simulations* (Ed. by Harbaugh J.W., Watney W.L., Rankey, E.C., Slingerland, R., Goldstein, R.H.), Geological Society Special Publication, **62**, 197–210.
- GRANJEON, D., WOLF, S., 2007. 3D stratigraphic modeling in complex tectonics area. AAPG Search and Discover Article #90063©2007 Am. Assoc. Petrol. Geol. Annual Convention, Long Beach, California.
- GUÉX, J., MORARD, A., BARTOLINI, A., MORETTINI, E., 2001. Découverte d'une importante lacune stratigraphique à la limite Domérien-Toarcien : implications stratigraphiques. *Bull. Soc. Vaud. Sc. Nat.*, **87**, 277–284.
- GUILLOCHEAU, F., 1991. Mise en évidence de grands cycles transgression-régression d'origine tectonique dans les sédiments mésozoïques du Bassin de Paris. *Comptes Rendus de l'Académie des sciences*, **2**, 1587–1593.
- GUILLOCHEAU, F., ROBIN, C., ALLEMAND, P., BOURQUIN, S., BRAULT, N., DROMART, G., FRIEDENBERG, G., GARCIA, J.-P., GAULIER, J.-M., GAUMET, F., GROSDOY, B., HANOT, F., LE STRAT, P., METTRAUX,

- M., NALPAS, T., PRIJAC, C., RIGOLLET, C., SERRANO, O., VAIRON, J., GRANJEAN, G., 2000. Mesocenozoic geodynamic evolution of the Paris Basin: 3D stratigraphic constraints. *Geodin. Acta*, **13**, 189–246.
- HALLAM, A., 1967. The depth significance of shales with bituminous laminae. *Marine Geology*, **5**, 481–493.
- HALLAM, A., BRADSHAW, M.J., 1979. Bituminous shales and oolitic ironstones as indicators of transgressions and regressions. *Journal of Geological Society of London*, **136**, 57–164.
- HANZO, M., 1978. A propos de nodules carbonatés du Toarcien inférieur de la région de Bettembourg (Grand-Duché de Luxembourg). *Congrès national des sociétés savantes, fascicule IV*, Nancy, **103**, 343–349.
- HANZO, M., 1979. Milieu de dépôt et évolution diagénétique des argilites toarciennes d'après l'étude de nodules carbonatés des "Schistes carton" de Bettembourg (Grand-Duché de Luxembourg). *Sciences de la Terre Nancy (Sci. Terre)*, **23**, 45–59.
- HANZO, M., ESPITALIÉ, J., 1993. Relation entre matière organique et sédimentation dans le Lias de Lorraine (France). *Comptes Rendus de l'Académie des sciences*, **2(316)**, 945–950.
- HAQ, B.U., HARDENBOL, J., VAIL, P.R., 1987. Chronology of Fluctuating Sea Levels Since the Triassic. *Science*, **235**, 1156–1167.
- HARDENBOL, J., THIERRY, J., FARLEY, M.B., JACQUIN, T., DE GRACIANSKY, P.-C., VAIL, P.R., 1998. Mesozoic and Cenozoic Sequence Chronostratigraphic Framework of European Basins. In: *Mesozoic and Cenozoic Sequence Stratigraphy of European Basins* (Ed. by De Graciansky, P.C., Hardenbol, J., Jacquin, T., Vail, P. R.), SEPM Special Publication, **60**, Chart 1 and 6.
- HARRIES, P.J., LITTLE, C.T.S., 1999. The early Toarcian (Early Jurassic) and the Cenomanian-Turonian (Late Cretaceous) mass extinctions: similarities and contrasts. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, **154**, 39–66.
- HEDGES, J.I., KEIL, R.G., 1995. Sedimentary organic matter preservation: an assessment and speculative synthesis. *Marine Chemistry*, **49**, 81–115.
- HEDGES, J.I., KEIL, R.G., 1999. Organic geochemical perspectives on estuarine processes: sorption reactions and consequences. *Maine Chemistry*, **65**, 55–65.
- HEDGES, J.I., OADES, J.M., 1997. Comparative organic geochemistries of soils and marine sediments. *Organic Geochemistry*, **27**, 319–361.
- HENROTAY, M., MARQUES, D., PAICHELIER, J.C., GALL, J.C., NEL, A., 1998. Le Toarcien inférieur des régions de Bascharage et de Bettembourg (grand-duché du Luxembourg) : evidences paléontologiques et sédimentologiques d'environnements restraints proches de l'émersion. *Geodiversitas*, **20**, 263–284.
- HERMOSO, M., LE CALLONNEC, L., MINOLETTI, F., RENARD, M., HESSELBO, S.P., 2009a. Expression of the Early Toarcian negative carbon-isotope excursion in separated carbonate microfractions (Jurassic, Paris Basin). *Earth Planet. Sci. Lett.*, **277**, 194–203.
- HERMOSO, M., MINOLETTI, F., LE CALLONNEC, L., JENKYN, H.C., HESSELBO, S.P., RICKABY, R.E.M., RENARD, M., DE RAFÉLIS, M., EMMANUEL, L., 2009b. Global and local forcing of Early Toarcian seawater chemistry: a comparative study of different paleoceanographic settings (Paris and Lusitanian basins). *Paleoceanography*, **24**, 1–15.
- HERMOSO, M., MINOLETTI, F., RICKABY, R.E.M., HESSELBO, S.P., BAUDIN, F., JENKYN, H.C., 2012. Dynamics of a stepped carbon-isotope excursion: ultra high-resolution study of Early Toarcian environmental change. *Earth Planet. Sci. Lett.*, **319**, 45–54.
- HERMOSO, M., MINOLETTI, F., PELLENARD, P., 2013. Black shale deposition during Toarcian super-greenhouse driven by sea level. *Clim. Past*, **9**, 2703–2712.
- HERMOSO, M., PELLENARD, P., 2014. Continental weathering and climatic changes inferred from clay mineralogy and paired carbon isotopes across the early to middle Toarcian in the Paris Basin. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, **399**, 385–393.
- HESSELBO, S.P., GRÖCKE, D.R., JENKYN, H.C., BJERRUM, C.J., FARRIMOND, P., MORGANS, H.S., GREEN, O.R., 2000. Massive dissociation of gas hydrate during a Jurassic oceanic event. *Nature*, **406**, 392–395.
- HESSELBO, S.P., JENKYN, H.C., DUARTE, L.V., OLIVIERA, L., 2007. Sequence stratigraphy at times of extraordinary sediment supply in the Jurassic - Formation of a pseudo-sequence boundary during the Early Toarcian Oceanic Anoxic Event? Sea level changes: records, processes and modelling Meeting, Aix-en-Provence, France.
- HOLLANDER, D.J., BESSERAU, G., BELIN, S., HUC, A.Y., HOUZAY, J.P., 1991. Organic matter in the early Toarcian shales, Paris Basin, France: a response to environmental changes. *Revue de l'Institut Français du Pétrole*, **46**, 543–562.
- HONJO, S., MANGANINI, S.J., KRISHFIELD, R.A., FRANCOIS, R., 2008. Particulate organic carbon fluxes to the ocean interior and factors controlling the biological pump: a synthesis of global sediment trap programs since 1983. *Progress in Oceanography*, **76**, 217–285.
- IBACH, L.E.J., 1982. Relationship Between Sedimentation Rate and Total Organic Carbon Content in Ancient Marine Sediments. *AAPG Bull.*, **66**, 170–188.
- INTHORN, M., WAGNER, T., SCHEEDER, G., ZABEL, M., 2006. Lateral transport controls distribution, quality, and burial of organic matter along continental slopes in high-productivity areas. *Geology*, **34**, 205–208.

- JACQUART, G., DEVILLE, E., 1996. *Le Sud du Jura et la Région Rhône-Alpes*. Rapport régional d'évaluation pétrolière, Institut Français du Pétrole, 88 p.
- JENKYNS, H.C., 1985. The early Toarcian and Cenomanian–Turonian Anoxic Events in Europe: comparisons and contrasts. *Geologische Rundschau*, **74**, 505–518.
- JENKYNS, H.C., 1988. The Early Toarcian (Jurassic) anoxic event: stratigraphic, sedimentary and geochemical evidence. *Am. J. Sci.*, **288**, 101–151.
- JENKYNS, H.C., 1999. Mesozoic anoxic events and palaeoclimate. *Zbl. Geol. Paläont.*, **1**, 943–949.
- JENKYNS, H.C., 2003. Evidence for rapid climate change in the Mesozoic–Palaeogene greenhouse. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Physical, Mathematical and Engineering Sciences*, **361**, 1885–1916.
- JENKYNS, H.C., 2010. The geochemistry of Oceanic Anoxic Events. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, **11**(3), 1–30.
- JENKYNS, H.C., CLAYTON, C.J., 1986. Black shales and carbon isotopes in pelagic sediments from the Tethyan Lower Jurassic. *Sedimentology*, **33**, 87–106.
- JENKYNS, H.C., CLAYTON, C.J., 1997. Lower Jurassic epicontinental carbonates and mudstones from England and Wales: chemostratigraphic signals and the early Toarcian anoxic event. *Sedimentology*, **44**, 687–706.
- JENKYNS, H.C., GRÖCKE, D.R., HESSELBO, S.P., 2001. Nitrogen isotope evidence for water mass denitrification during the early Toarcian (Jurassic) oceanic anoxic event. *Paleoceanography*, **16**, 1–11.
- JENKYNS, H.C., JONES, C.E., GRÖCKE, D.R., HESSELBO, S.P., PARKINSON, D.N., 2002. Chemostratigraphy of the Jurassic System: applications, limitations and implications for palaeoceanography. *Geological Society of London*, **159**, 351–378.
- JGOFS Project (Joint Global Ocean Flux Study) [en ligne]. Scientific Committee on Oceanic Research. Disponible sur : <<http://www1.whoi.edu/jgofMission.html>> (consulté le 28.08.2016).
- JONES, C.E., JENKYNS, H.C., 2001. Seawater strontium isotopes, oceanic anoxic events, and seafloor hydrothermal activity in the Jurassic and Cretaceous. *American Journal of Science*, **301**, 112–149.
- KATZ, B.J., PRATT, L.M., 1993. Sources rocks in a sequence stratigraphic framework. *American Association of Petroleum Geologists Studies in Geology*, **37**, 247 p.
- KAUFFMAN, E.G., 1981. Ecological reappraisal of the German Posidonienschiefer (Toarcian) and the stagnant basin model. In: *Communities of the Past: Stroudsburg* (Ed. by Gray, J., Boucot, A.J., Berry, W.B.N.), Hutchinson, Ross Publ., Pennsylvania, 311–381.
- KORTE, C., HESSELBO, S.P., 2011. Shallow marine carbon and oxygen isotope and elemental records indicate icehouse-greenhouse cycles during the Early Jurassic. *Paleoceanography*, **26**, PA4219.
- KULLBERG, J.C., OLORIZ, F., MARQUES, B., CAETANO, P.S., ROCHA, R.B., 2001. Flat-pebble conglomerates: a local marker for Early Jurassic seismicity related to syn-rift tectonics in the Sesimbra area (Lusitanian Basin, Portugal). *Sediment. Geol.*, **139**, 49–70.
- KÜSPERT, W., 1982. Environmental changes during oil shale deposition as deduced from stable isotope ratios. In: *Cyclic and Event Stratification* (Ed. by Einsele, G., Seilacher, A.), Springer, Berlin, 482–501.
- LEINFELDER, R.R., WILSON, R.C.L., 1998. Third-order sequences in an Upper Jurassic Rift-related second-order sequence, Central Lusitanian Basin, Portugal. In: *Mesozoic and Cenozoic Sequence Stratigraphy of European Basins* (Ed. by Graciansky, P.C., Hardenbol, J., Jacquin, T., Vail, P.R.), SEPM Special Publication, **60**, 507–52.
- LEONIDE, P., 2007. *Réponses des plates-formes carbonatées aux changements paléo-océanographiques, paléo-climatiques et tectoniques, le Bassin Sud-Provençal au Jurassique Inférieur à Moyen*. Thèse de l'Université de Provence, 385 p.
- LETHIERS, F., 1998. *Évolution de la biosphère et événements géologiques*. Gordon and Breach Publishers, 223 p.
- LITKE, R., ROTZAL, H., LEYTHAEUSER, D., BAKER D., R., 1991. Lower Toarcian Posidonia Shale in southern Germany (Schwäbische Alb). Organic facies, depositional environment, and maturity. *Erdöl und Kohle, Erdgas, Petrochemie vereinigt mit Brennstoff-Chemie*, **44**, 407–414.
- LORENZ, C., MEGNIEN, C., WEBER, C., and others, 1987. Premiers résultats du sondage implanté sur l'Anomalie magnétique du Bassin de Paris, au Sud de Sancerre (Cher). Programme Géologie profonde de la France. *C. R. Acad. Sci. Paris*, **305**, 1099–1104.
- LORENZ, C., LEFAVRAIS, A., LORENZ, J., MARCHAND, D., MILON, R., 1991. Calage stratigraphique du Jurassique du Sud du Bassin Parisien à partir de la série carottée du sondage de Sancerre-Couy (Programme Géologie profonde de la France). *Bull. Soc. géol. France*, **162**, 947–952.
- LYELL, C. 1830–1833. *Principles of Geology*. 3 vols. Murray, London, UK.
- MACCHIONI, F., CECCA, F., 2002. Biodiversity and biogeography of middle–late liassic ammonoids: implications for the early Toarcian mass extinction. *Geobios*, **35**, 165–175.
- MACQUAKER, J.H.S., BOHACS, K.M., 2007. On the Accumulation of Mud. *Science*, **318**, 1734–1735.
- MACQUAKER, J.H.S., TAYLOR, K.G., GAWTHORPE, R.L., 2007. High-Resolution Facies Analyses of Mudstones: Implications for Palaeoenvironmental and Sequence Stratigraphic Interpretations of Offshore Ancient Mud-Dominated Successions. *Journal of Sedimentary Research*, **77**, 324–339.

- MAILLIOT, S., MATTIOLI, E., GUEX, J., PITTET, B., 2006. The Early Toarcian anoxia, a synchronous event in the Western Thethys? An approach by quantitative biochronology (Unitary Associations), applied on calcareous nannofossils. *Palaeogeography, Palaeoclimatology, Palaeoecology*, **240**, 562–586.
- MANN, U., STEIN, R., 1997. Organic facies variations, source rock potential, and sea level changes in Cretaceous black shales of the Quebrada Ocal, Upper Magdalena Valley, Colombia. *American Association of Petroleum Geologists Bulletin*, **81**, 556–576.
- MANN, U., ZWEIGEL, J., 2002. Organic Facies Modeling (OF-Mod) Documentation of the simulation program Part I. Revised version. *SINTEF Petroleum Research Report*.
- MANN, U., ZWEIGEL, J., 2008. Modeling source-rock distribution and quality variations: the organic facies modelling approach. *Spec. Publ. Int. Assoc. Sedimentol.*, **40**, 139–274.
- MARTIN, J.H., KNAUER, G.A., KARL, D.M., BROENKOW, W.W., 1987. VERTEX: carbon cycling in the northeast Pacific. *Deep-Sea Research*, **34**, 267–285.
- MATTIOLI, E., ERBA, E., 1999. Biostratigraphic synthesis of calcareous nannofossil events in the Tethyan Lower and Middle Jurassic successions. *Rivista Italiana di Paleontologia e Stratigrafia Journal*, **105**, 343–376.
- MATTIOLI, E., PITTET, B., BUCEFALO PALLIANI, R., RÖHL, H.J., MORETTINI, E., 2004a. Phytoplankton evidence for the timing and correlation of palaeoceanographical changes during the early Toarcian oceanic anoxic event (Early Jurassic). *Geological Society of London*, **161**, 685–69.
- MATTIOLI, E., PITTET, B., YOUNG, J.R., BOWN, P.R., 2004b. Biometric analysis of Pliensbachian-Toarcian (Lower Jurassic) coccoliths of the family Biscutaceae: intra- and interspecific variability versus palaeoenvironmental influence. *Marine Micropaleontology*, **52**, 5–27.
- MAUFFRET, A., MOUGENOT, D., MILES, P.R., MALOT, J.A., 1989. Cenozoic deformation and Mesozoic abandoned spreading center in the Tagus Abyssal Plain (West Portugal): results of a multichannel seismic survey. *Can. J. Earth Sci.*, **26**, 1101–1123.
- MCARTHUR, J.M., 2007. Comment on “Carbon-isotope record of the Early Jurassic (Toarcian) Oceanic Anoxic Event from fossil wood and marine carbonate (Lusitanian Basin, Portugal)” by Hesselbo S., Jenkyns H.C., Duarte L.V., Oliveira L.C.V. *Earth and Planetary Science Letters*, **259**, 634–639.
- MCARTHUR, J.M., DONOVAN, D.T., THIRLWALL M.F., FOUKE, B.W., MATTEY, D., 2000. Strontium isotope profile of the early Toarcian (Jurassic) oceanic anoxic event, the duration of ammonite biozones, and belemnite palaeotemperatures. *Earth planetary science letter*, **179**, 269–285.
- MCELWAIN, J.C., CHALONER, W., 1996. The Fossil Cuticle as a Skeletal Record of Environmental Change. *Palaios*, **11**, 376–388.
- MEISTER, C., 2010. Worldwide ammonite correlation at the Pliensbachian Stage and Substage Boundaries (Lower Jurassic). *Stratigraphy*, **7**, 83–101.
- MENDONÇA FILHO, J.G., MENEZES, T.R., MENDONÇA, J.O., 2011. Chapter 5: Organic composition (Palynofacies Analysis). In: *ICCP, Training Course on Dispersed Organic Matter* (Ed. by Flores, D., Marques, M.), International Committee for Coal and Organic Petrology, Porto, 33–81.
- MERLIN+ Project [en ligne]. CGG. Disponible sur : <<http://www.cgg.com/en/What-We-Do/Multi-Client-Data/Geological/Merlin>> (consulté le 05.09.2016).
- MIDDELBURG, J.J., MEYSMAN, F.J.R., 2007. Burial at sea. *Science*, **316**, 1294–1295.
- MODIS Project (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer) [en ligne]. National Aeronautics and Space Administration. Disponible sur : <http://modis.gsfc.nasa.gov/> (consulté le 28.08.2016).
- MORARD, A., GUEX, J., BARTOLINI, A., MORETTINI, E., DE WEVER, P., 2003. A new scenario for the Domerian-Toarcian transition. *Bulletin de la Société Géologique de France*, **174**, 351–356.
- MOUTERDE, R., 1967. Le Lias du Portugal. Vue d’ensemble et division en zones. *Comunicações dos Serviços Geológicos de Portugal*, **52**, 209–226.
- MOUTERDE, R., LEFAVRAIS-RAYMOND, A., ELMI, S., RIOULT, M., TINTANT, H., 1980. Carte Paléogéographique de l’Hettangien inférieur. In: *Synthèse paleogeographique du Jurassique Français* (Ed. by Enay, R., Mangold, C., Cariou, E., Contini, D., Debrand Passard, S., Donze, P., Gabilly, J., Lefavrais Raymond, A., Mouterde, R., Thierry, J.), 12–13.
- MOUTERDE, R., ROCHA, R.B., DELANCE, J., 1981. Atlas des fossiles caractéristiques du Lias portugais. *Ciências da Terra*, **6**, 49–76.
- NORDLUND, U., 1996. Formalizing geological knowledge – With an example of modeling stratigraphy using fuzzy logic. *J. Sediment. Res.*, **66**, 689–698.
- OGG, J.G., HINNOV, L.A., 2012. Jurassic. In: *The Geologic Time Scale, 2012* (Ed. by Gradstein, F.M., Ogg, J.G., Schmitz, M.D., Ogg, G.), Elsevier, Oxford, Amsterdam, Waltham, 731–791.
- OLIVEIRA, L.C., RODRIGUES, R., DUARTE, L.V., LEMOS, V., 2006. Avaliação do potencial gerador de petróleo e interpretação paleoambiental com base em biomarcadores e isótopos estáveis do carbono da seção Pliensbachiano-Toarciano inferior (Jurássico inferior) da região de Peniche (Bacia Lusitânica, Portugal). *Boletim de Geociências da Petrobras*, **14**, 207–234.

- PÁLFY, J., SMITH, P.L., 2000. Synchrony between Early Jurassic extinction, oceanic anoxic event, and the Karoo-Ferrar flood basalt volcanism. *Geology*, **28**, 747–50.
- PÁLFY, J., PARRISH, R.R., SMITH, P.L., 1997. A UPb age from the Toarcian (Lower Jurassic) and its use for time scale calibration through error analysis of biochronologic dating. *Earth and Planetary Science Letters*, **146**, 659–675.
- PANCOAST, R. D., CRAWFORD, N., MAGNESS, S., TURNER, A., JENKYN, H. C., MAXWELL, J. R., 2004. Further evidence for the development of photic-zone euxinic conditions during Mesozoic oceanic anoxic events. *Geological Society of London*, **161**, 353–364.
- PARRISH, J.T., CURTIS, R.L., 1982. Atmospheric circulation, upwelling, and organic-rich rocks in the Mesozoic and Cenozoic areas. *Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology*, **40**, 31–66.
- PASLEY, M.A., RILEY, G.W., NUMMEDAL, D., 1993. Sequence stratigraphy significance of organic matter variations: Example from the Upper Cretaceous Mancos Shale of the San Juan Basin, New Mexico. In: *Source Rocks in a Sequence Stratigraphic Framework* (Ed. by Katz B.J., Pratt L.M.), American Association of Petroleum Geologists Studies in Geology, Tulsa, 221–241.
- PASSEY, Q.R., CREANEY, S., KULLA, J.B., MORETTI, F.J., STROUD, J.D., 1990. A practical model for organic richness from porosity and resistivity logs. American Association of Petroleum Geologists Bulletin, **74**, 454–466.
- PASSEY, Q.R., BOHACS, K.M., ESCH, W.L., KLIMENTIDIS, R., SINHA, S., 2010. From Oil-Prone Source Rock to Gas-Producing Shale Reservoir - Geologic and Petrophysical Characterization of Unconventional Shale Gas Reservoirs. Society of Petroleum Engineers. International Oil and Gas Conference and Exhibition in China, 8-10 June, Beijing, China.
- PEDERSEN, T.F., CALVERT, S.E., 1990. Anoxia vs. Productivity: What Controls the Formation of Organic-Carbon-Rich Sediments and Sedimentary Rocks? *AAPG Bull.*, **74**, 454–466.
- PÉNIGUEL, G., COUDERC, R., SEYVE, C., 1989. Les microalgues actuelles et fossiles – intérêts stratigraphique et pétrolier. *Bull. Cent. Rech. Explor. Prod. Elf Aquitaine*, **13**, 455–482.
- PILSON, M.E.Q., 2012. *An introduction to the chemistry of the sea*. Cambridge University Press, 287–294.
- PITCHER, G.C., FIGUEIRAS, F.G., HICKEY, B.M., MOITA, M.T., 2011. The physical oceanography of upwelling systems and the development of harmful algal blooms. *Prog Oceanogr.*, **85**, 5–32.
- PLANCQ, J., MATTIOLI, E., PITTET, B., BAUDIN, F., DUARTE, L.V., BOUSSAHA, M., GROSSI, V., 2016. A calcareous nannofossil and organic geochemical study of marine palaeoenvironmental changes across the Sinemurian/Pliensbachian (early Jurassic, ~191 Ma) in Portugal. *Palaeogeogr. Palaeoclimatol. Palaeoecol.*, **449**, 1–12.
- POMPECKJ, J.F., 1901. Der Jura zwischen Regensburg und Regensburg: Geognostische Jahreshefte, **14**, 139–220.
- PRICE, G.D., 1999. The evidence and implications of polar ice during the Mesozoic. *Earth-Science Reviews*, **48**, 183–210.
- QUESADA, S., 2013. *Conventional and Unconventional Potential of Source Rocks*. Nautilus field-guide, 135–151.
- RABINEAU, M., BERNE, S., ASLANIAN, D., OLIVET, J.-L., JOSEPH, P., GUILLOCHEAU, F., BOURILLET, J.-F., LEDREZEN, E., GRANJEON, D., 2005. Sedimentary sequences in the Gulf of Lion: a record of 100,000 years climatic cycles. *Mar. Petrol. Geol.*, **22**, 775–804.
- RASMUSSEN, E. S., LOMHOLT S., ANDERSEN C., VEJBAEK, O. V., 1998. Aspects of the structural evolution of the Lusitanian basin in Portugal and the shelf and slope area offshore Portugal. *Tectonophysics*, **300**, 199–225.
- RAZIN, P., BONIJOLY, D., LE STRAT, P., COUREL, L., POLI, E., DROMART, G., ELMI, S., 1996. Stratigraphic record of the structural evolution of the western extensional margin of the Subalpine Basin during the Triassic and Jurassic, Ardèche, France. *Marine and Petroleum Geology*, **13**, 625–652.
- REIS, R.P.B.P., PROENÇA CUNHA, P., DINIS, J.L., TRINCÃO, P.R., 2000. Geological evolution of the Lusitanian Basin (Portugal) during the Late Jurassic. *GeoRes. Forum*, **6**, 345–356.
- RIBEIRO, N.P., MENDONÇA, J.G., DUARTE, L.V., SILVA, R.L., MENDONÇA, J.O., SILVA, T.F., 2013. Palynofacies and organic geochemistry of the Sinemurian carbonate deposits in the western Lusitanian Basin (Portugal): Coimbra and Agua de Madeiros formations. *Int. J. Coal Geol.*, **111**, 37–52.
- ROERING, J.J., KIRCHNER, J.W., DIETRICH, W.E., 1999. Evidence for nonlinear, diffusive sediment transport on hillslopes and implications for landscape morphology. *Water Resour. Res.*, **35**, 853–870.
- RÖHL, H.J., SCHMID-RÖHL, A., 2005. Lower Toarcian (upper liassic) black shales of the central European epicontinental basin: a sequence stratigraphic case study from the SW German Posidonia shale. *SPM Special Publication*, **82**, 165–189.
- RÖHL, H.J., SCHMID-RÖHL, A., OSCHMANN, W., FRIMMEL, A., SCHWARK, L., 2001. The Posidonia Shale (Lower Toarcian) of SW-Germany An oxygen-depleted ecosystem controlled by sea level and palaeoclimate. *Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology*, **165**, 27–52.
- ROMANO, M., 2015. Reviewing the term uniformitarianism in modern Earth sciences. *Earth-Science Reviews*, **148**, 65–76.
- ROMERO-SARMIENTO, M., DUCROS, M., CARPENTIERA, B., LORANT, F., CACAS, M.-C., PEGAZ-FIORNET, S., WOLF, S., ROHAIS, S., MORETTI, I., 2013. Quantitative evaluation of TOC, organic porosity and gas retention distribution in a gas shale play using petroleum system modeling: Application to the Mississippian Barnett Shale. *Mar. Petrol. Geol.*, **45**, 315–330.

- ROTH, P.H., 1987. Mesozoic calcareous nannofossil evolution: relation to paleoceanographic events. *Paleoceanography*, **2**, 601–611.
- SALIOT, A., 1994. Biochimie organique marine. *Oceanis*, **20**, 197 p.
- SATHYENDRANATH, S., PLATT, T., 2013. Primary Production Distribution. *Reference Module in Earth Systems and Environmental Sciences*, 2013, Current as of 24 November 2014. Sc. Pub., 321 p.
- SCHIEBER, J., SOUTHARD, J., THAISEN, K., 2007. Accretion of Mudstone Beds from Migrating Floccule Ripples. *Science*, **318**, 1760–1763.
- SCHLANGER, S.O., JENKYN, H.C., 1976. Cretaceous oceanic anoxic event: causes and consequences. *Geologie en Mijnbouw*, **55**, 179–184.
- SCHMID-RÖHL, A., RÖHL, H.-J., OSCHMANN, W., FRIMMEL, A., SCHWARK, L., 2002. Palaeoenvironmental reconstruction of Lower Toarcian epicontinental black shales (Posidonia Shale, SW Germany): global versus regional control. *Geobios*, **35**, 13–20.
- SCHOUTEN, S., VAN KAAM-PETERS, H.M.E., RIJSTRA, W.I.C., SCHOELL, M., SINNINGHE DAMSTÉ, J.S., 2000. Effects of an oceanic event on the stable carbon isotopic composition of early Toarcian carbon. *American Journal of Science*, **300**, 1–22.
- SCHWARK, L., FRIMMEL, A., 2004. Chemostratigraphy of the Posidonia Black Shale, SW-Germany II. Assessment of extent and persistence of photic-zone anoxia using aryl isoprenoid distributions. *Chemical Geology*, **206**, 231–248.
- SCHWARZKOPF, T.A., 1993. Model for prediction of organic carbon content in possible source rocks. *Marine Petroleum Geology*, **10**, 478–491.
- SCOTSE, C. R., 2001. *Atlas of Earth History*, Volume 1, Paleogeography. PALEOMAP Project, Arlington, Texas, Early Jurassic Paleogeographic map.
- SeaWiFS Project (Sea-Viewing Wide Field-of-View Sensor) [en ligne]. National Aeronautics and Space Administration. Disponible sur : <http://seawifs.gsfc.nasa.gov/SEAWIFS.html> (consulté le 28.08.2016).
- SILVA, R.L., DUARTE, L.V., 2015. Organic matter production and preservation in the Lusitanian Basin (Portugal) and Pliensbachian climatic hot snaps. *Global Planet. Change*, **131**, 24–34.
- SILVA, R.L., DUARTE, L.V., COMAS-RENGIFO, M.J., MENDONÇA FILHO, J.G., AZERÊDO, A.C., 2011. Update of the carbon and oxygen isotopic records of the Early–Late Pliensbachian (Early Jurassic, ~187 Ma): Insights from the organic-rich hemipelagic series of the Lusitanian Basin (Portugal). *Chemical Geology*, **283**, 177–184.
- SILVA, R.L., MENDONÇA FILHO, J.G., DA SILVA, F.S., DUARTE, L.V., SILVA, T.F., FERREIRA, R., AZERÊDO, A.C., 2012. Can biogeochemistry aid in the palaeoenvironment/early diagenesis reconstruction of the ~187 Ma (Pliensbachian) organic-rich hemipelagic series of the Lusitanian Basin (Portugal)? *Bull. Geosci.*, **87**, 373–382.
- SILVA, R.L., DUARTE, L.V., COMAS-RENGIFO, M.J., 2015. Carbon isotope chemostratigraphy of Lower Jurassic carbonate deposits, Lusitanian Basin (Portugal): implications and limitations to the application in sequence stratigraphic studies. In: *Chemostratigraphy: Concepts, Techniques and Applications* (Ed. by Ramkumar, M.), Elsevier, New York, 341–371.
- SINNINGHE DAMSTÉ, J.S., DE LEEUW, J.W., 1990. Analysis, structure and geochemical significance of organically-bound sulphur in the geosphere: State of the art and future research. *Organic Geochemistry*, **16**, 1077–1101.
- SOARES, A.F., ROCHA, R.B., ELMI, S., HENRIQUES, M.H., MOUTERDE, R., ALMERAS, Y., RUGET, G., MARQUES, J., DUARTE, L.V., CARAPITO, C., KULLBERG, J.C., 1993. Le sous-bassin nord-lusitanien (Portugal) du Trias au Jurassique moyen: histoire d'un "rift avorté". *Comptes rendus de l'Académie des sciences de Paris*, **317**, 1659–1666.
- SOLLINS, P., HOMANN, P., CALDWELL, B.A., 1996. Stabilization and destabilization of soil organic matter: mechanisms and controls. *Geoderma*, **74**, 65–105.
- SONG, J., LITKE, R., WENIGER, P., OSTERTAG-HENNING, C., NELSKAMP, S., 2015. Shale oil potential and thermal maturity of the Lower Toarcian Posidonia Shale in NW Europe. *International Journal of Coal Geology*, **150–151**, 127–153.
- STECKLER, M.S., SWIFT, D.J.P., SYVITSKI, J.P., GOFF, J.A., NIEDORODA, A.W., 1996. Modeling sedimentology and stratigraphy of continental margins. *Oceanography*, **9**, 183–188.
- STEEMANN NIELSEN, E., 1952. The use of radioactive carbon (C14) for measuring organic production in the sea. *Journal du Conseil International pour l'Exploration de la Mer*, **18**, 117–140.
- STEIN, R., 1986. Organic carbon and sedimentation rate – Further evidence for anoxic deep-water conditions in the Cenomanian/Turonian Atlantic Ocean. *Marine Geology*, **72**, 199–209.
- STILING, P., 1996. *Ecology: Theories and Applications – First edition* (Ed. by Prentice Hall), California University, 539 p.
- STOW, D.A.V., HUC, A.Y., BERTRAND, P., 2001. Depositional processes of black shales in deep water. *Marine and Petroleum Geology*, **18**, 491–498.
- SUAN, G., MATTIOLI, E., PITTET, B., LECUYER, C., SUCHERAS-MARX, B., DUARTE, L.V., PHILIPPE, M., REGGIANI, L., MARTINEAU, F., 2010. Secular environmental precursors to Early Toarcian (Jurassic) extreme climate changes. *Earth and Planetary Science Letters*, **290**, 448–458.

- SUESS, E., 1980. Particulate organic carbon flux in the oceans – surface productivity and oxygen utilization. *Nature*, **288**, 260–263.
- SYVITSKI, J.P.M., HUTTON, E.W.H., 2001. 2D SEDFLUX 1.0C: An advanced process-response numerical model for the fill of marine sedimentary basins. *Computer and Geoscience*, **27**, 731–753.
- TETZLAFF, D.M., 1989. SEDO: A simple clastic sedimentation program for use in training and education. In: *Quantitative Dynamic Stratigraphy* (Ed. by Cross, T.A.), Prentice-Hall, 401–415.
- THIERRY, J., 2000. Paleogeographic map of Late Sinemurian. In: *Atlas peri-Tethys palaeogeographical maps* (Ed. by Dercourt, J., Gaetani, M., Vrielynck, B., Barrier, E., Biju-Duval, B., Brunet, M.F., Cadet, J.P., Crasquin, S., Sandulescu, M.) Peri-Tethys Programme, 1 map.
- THIERRY, J., BARRIER, E., 2000. Paleogeographic map of Middle Toarcian. In: *Atlas peri-Tethys palaeogeographical maps* (Ed. by Dercourt, J., Gaetani, M., Vrielynck, B., Barrier, E., Biju-Duval, B., Brunet, M.F., Cadet, J.P., Crasquin, S., Sandulescu, M.) Peri-Tethys Programme, 1 map.
- THOMSEN, L., GUST, G., 2000. Sediment erosion thresholds and characteristics of resuspended aggregates on the western European continental margin. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, **47**, 1881–1897.
- THOMSEN, L., MCCAVE, I.N., 2000. Aggregation processes in the benthic boundary layer at the Celtic Sea continental margin. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, **47**, 1389–1404.
- THOMSEN, L., VAN WEERING T.J.C.E., 1998. Spatial and temporal variability of particulate matter in the benthic boundary layer at the N.W. European Continental Margin (Goban Spur). *Progress in Oceanography*, **42**, 61–76.
- TRABUCHO-ALEXANDRE, J., DIRKX, R., VELD, H., KLAVER, G., DE BOER, P.L., 2012. Toarcian Black Shales In the Dutch Central Graben: Record of Energetic, Variable Depositional Conditions During An Oceanic Anoxic Event. *Journal of Sedimentary Research*, **82**, 104–120.
- TYSON, R.V., 1995. *Sedimentary Organic Matter: Organic facies and palynofacies*. Chapman and Hall, London, 615 p.
- TYSON, R.V., 1996. Sequence-stratigraphical interpretation of organic facies variations in marine siliclastic systems: General principles and application to the onshore Kimmeridge Clay Formation, UK. S. P. In: *Sequence Stratigraphy in British Geology* (Ed. by Hesselbo S.P., Parkinson D.N.), Geol. Soc. Spec. Publ., **103**, 75–96.
- TYSON, R.V. 2001. Sedimentation rate, dilution, preservation, and total organic carbon: some results of a modelling study. *Organic Geochemistry*, **32**, 333–339.
- TYSON, R.V., 2004. Variation in marine total organic carbon through the type Kimmeridge Clay Formation (Late Jurassic), Dorset, UK. *Journal of the Geological Society*, **161**, 667–673.
- TYSON, R.V., 2005. The “productivity versus preservation” controversy: cause, flaws, and resolution. In: *The Deposition of Organic-Carbon-Rich Sediments: Models, Mechanisms, and Consequences* (Ed. by Harris, N.), SEPM Special Publication, **82**, 17–33.
- TYSON, R.V., PEARSON, T.H., 1991. Modern and Ancient Continental Shelf Anoxia. *Geological Society Special Publication*, **58**, 1–24.
- VAKHRAMEYEV, V.A., 1982. Classopolis pollen as indicator of Jurassic and Cretaceous climate. *International Geology Review*, **24**, 1190–1196.
- VAN AARSEN, B.G.K., ALEXANDER, R., KAGI, R.I., 2000. Higher plant biomarkers reflect palaeovegetation changes during Jurassic times. *Geochimica Cosmochimica Acta*, **64**, 1417–1424.
- VAN BREUGEL, Y., BAAS, M., SCHOUTEN, S., MATTIOLI, E., SINNINGHE DAMSTÉ, J.S., 2006. Isorenieratane record in black shales from the Paris Basin, France: Constraints on recycling of respired CO₂ as a mechanism for negative carbon isotope shifts during the Toarcian oceanic anoxic event. *Paleoceanography*, **21**, 1–8.
- VAN BUCHEM, F.S.P., HUC, A.Y., PRADIER, B., STEFANI, M., 2005. Stratigraphic patterns in carbonate source-rock distribution: second-order to fourth-order control and sediment flux. In: *The deposition of organic-rich sediments: models, mechanisms, and consequences* (Ed. by Harris, N.B.), SEPM, Special publication, **82**, 191–224.
- VAN DE SHOOTBRUGGE, B., MCARTHUR, J.M., BAILEY, T.R., ROSENTHAL, Y., WRIGHT J.D., MILLER K.G., 2005a. Toarcian oceanic anoxic event: An assessment of global causes using belemnite C isotope records. *Paleoceanography*, **20**, 1–10.
- VAN DE SHOOTBRUGGE, B., BAILEY, T.R., ROSENTHAL, Y., KATZ, M.E., WRIGHT, J.D., MILLER, K.G., FEIST-BURKHARDT, S., FALKOWSKI, P.G., 2005b. Early Jurassic climate change and the radiation of organic-walled phytoplankton in the Tethys Ocean. *Paleobiology*, **31**, 73–97.
- VERSTEEGH, G.J.M., BLOKKER, P., WOOD, G., COLLINSON, M.E., SINNINGHE DAMSTÉ, J.S., DE LEEUW, J.W., 2004. Oxidative polymerization of unsaturated fatty acids as a preservation pathway for microalgal organic matter. *Organic Geochemistry*, **35**, 1129–1139.
- WANG, Y., MOSBRUGGER V., ZHANG, H., 2005. Early to Middle Jurassic vegetation and climatic events in the Qaidam Basin, Northwest China. *Palaeogeography Palaeoclimatology Palaeoecology*, **224**, 200–216.
- WANNESON, J., BESSERAU, G., 1999. *Bassin du Sud-Est*. Rapport régional d’évaluation pétrolière, Institut Français du Pétrole, 161 p.
- WARRLICH, G., WALTHAM, D., BOSENCE, D., 2001. Quantitative 3-D facies and sea level history prediction from stratigraphic computer modeling. American Association of Petroleum Geologists Annual Convention, A 211.

- WELLSBURY, P., GOODMAN, K., BARTH, T., CRAGG, B.A. BARNES, S.P., PARKES, R.J., 1997. Deep marine biosphere fuelled by increasing organic matter availability during burial and heating. *Nature*, **388**, 573–576.
- WIGNALL, P.B., 1991. Model for transgressive black shales? *Geology*, **19**, 167–1704.
- WHITAKER, M.F., 1984. The usage of palynostratigraphy and palynofacies in definition of Troll Field geology. In: *Offshore Northern Seas – Reduction of Uncertainties by Innovative Reservoir Geomodelling*. Nor. Petroleumsfören., Article G6.
- WIGNALL, P.B., 1994. *Black Shales*. Oxford monographs on geology and geophysics 30, 97 p.
- WIGNALL, P.B., MCARTHUR, J.M., LITTLE, C.T.S., HALLAM, A., 2006. Methane release in the Early Jurassic Period. *Nature*, **441**, E5.
- WILSON, R.C.L., HISCOTT, R.N., WILLIS, M.G., GRADSTEIN, F.M., 1989. The Lusitanian Basin of west-central Portugal: Mesozoic and Tertiary tectonic, stratigraphic and subsidence history. In: *Extensional Tectonics and Stratigraphy of the North Atlantic Margin* (Ed. by Tankard, A.J., Balkwill, H.R.), AAPG Memoir, **46**, 341–361.
- WRIGHT, V.P., WILSON, R.C.L., 1984. A Carbonate Submarine-Fan Sequence from the Jurassic of Portugal. *J. Sediment. Petrol.*, **54**, 394–412.
- ZIEGLER, A.M., PARRISH, J.M., JIPING, Y., GYLLENHAAL, E.D., ROWLEY, D.B., PARRISH, J.T., BEKKER, A., HULVER, M.L., 1993. Early Mesozoic phytogeography and climate. *Philosophical Transactions of the Royal Society*, **341**, 297–305.
- ZONNEVELD, K.A.F., VERSTEEGH, G.J.M., KASTEN, S., EGLINTON, T.I., EMEIS, K.-C., HUGUET, C., KOCH, B.P., DE LANGE, G.J., DE LEEUW, J.W., MIDDELBURG, J.J., MOLLENHAUER, G., PRAHL, F.G., RETHEMEYER, J., WAKEHAM, S.G., 2010. Selective preservation of organic matter in marine environments; processes and impact on the sedimentary record. *Biogeosciences*, **7**, 483–511.

ANNEXES

ANNEXE 1 : Article 3

en préparation pour le journal **Géologie de la France**.

Palynofaciès du Pliensbachien supérieur au Toarcien moyen du forage de Couy-Sancerre (Cher, bassin de Paris)

Benjamin BRUNEAU ^(1, 2) ; François BAUDIN ⁽¹⁾ ; Isabelle MORETTI ⁽²⁾

Lower Toarcian Palynofacies of the Couy-Sancerre borehole (Cher, Paris Basin)

¹ Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, Institut des Sciences de la Terre de Paris (ISTeP), 4 place Jussieu 75005 Paris, France

² ENGIE, Paris, France

Email : benjamin.bruneau@upmc.fr

Mot clés : Palynofaciès, Bassin de Paris, Matière Organique

Key words: Palynofacies, Paris Basin, Organic Matter

1. Introduction

Le sondage de Couy-Sancerre localisé dans le Sud du bassin de Paris ([Fig. 1](#)) et foré entre 1986 et 1987 dans le cadre du programme Géologie Profonde de la France (GPF), a fait l'objet d'un carottage continu de plus de 900 m, couvrant notamment l'intervalle Pliensbachien supérieur – Toarcien moyen ([Lorenz et al., 1987, 1991](#) ; [Delavenna et al., 1989](#) ; [Delavenna, 1990](#) ; [Gély et Lorenz, 1991](#)). Cet intervalle a fait l'objet de nombreuses analyses (e.g. biostratigraphie, minéralogie, isotopes, éléments traces, susceptibilité magnétique) intégrées notamment dans des études portant sur l'excursion négative du Toarcien et sa relation avec le T-OAE, la cyclostratigraphie et les conditions paléo-environnementales ([Hermoso et al., 2009a, 2012, 2013](#) ; [Hermoso et Pellenard, 2014](#)).

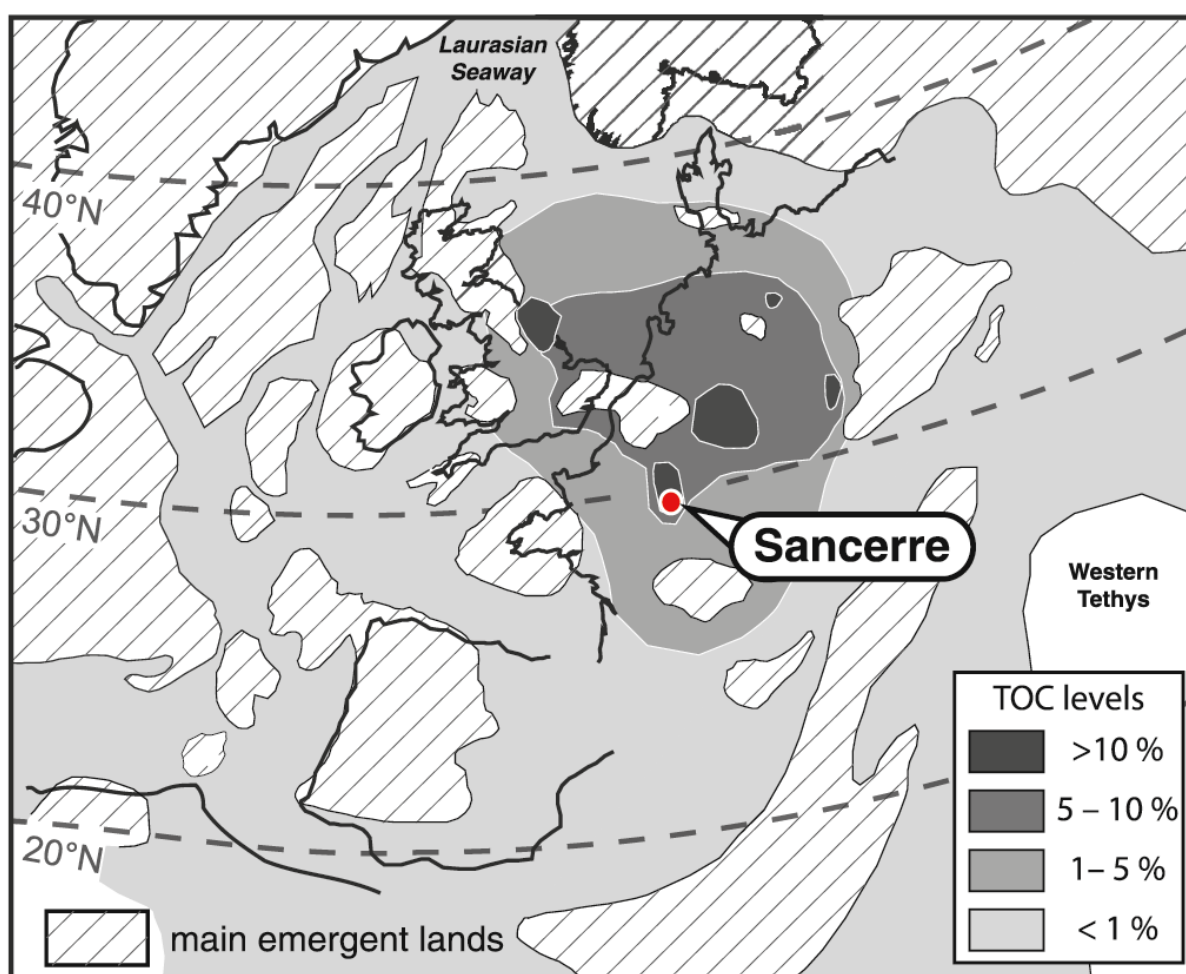


Fig. 1. Carte paléogéographique du Jurassique inférieur ouest-européen et distribution des teneurs en carbone organique (TOC) dans les sédiments du Toarcien inférieur. Sources : [Bassoulet et al. \(1993\)](#), [Baudin et al. \(1990\)](#), [Van de Schootbrugge et al. \(2005\)](#), [Hermoso et al. \(2009b\)](#).

L'épaisseur totale de l'intervalle Pliensbachien supérieur - Toarcien moyen est d'environ 50 m ([Lorenz, 1987](#) ; [Hermoso et al., 2009a](#)). [Hermoso et al. \(2013\)](#) fournissent une description précise de cet intervalle en termes de contenu organique (TOC) et de variations du niveau marin relatif ([Fig. 2](#)). Quatre intervalles de black shales y sont reconnus par ces auteurs lorsque le sédiment est laminé et que son TOC > 2 %. Les intervalles Sc1, Sc2 et Sc3 appartiennent à la

Formation Schistes carton (Toarcien inférieur) et l'intervalle Mb1 est localisé dans la Formation des Marnes à Bifrons, couvrant en réalité le sommet de la zone à Serpentinum et la base de la zone à Bifrons soit le passage Toarcien inférieur-moyen.

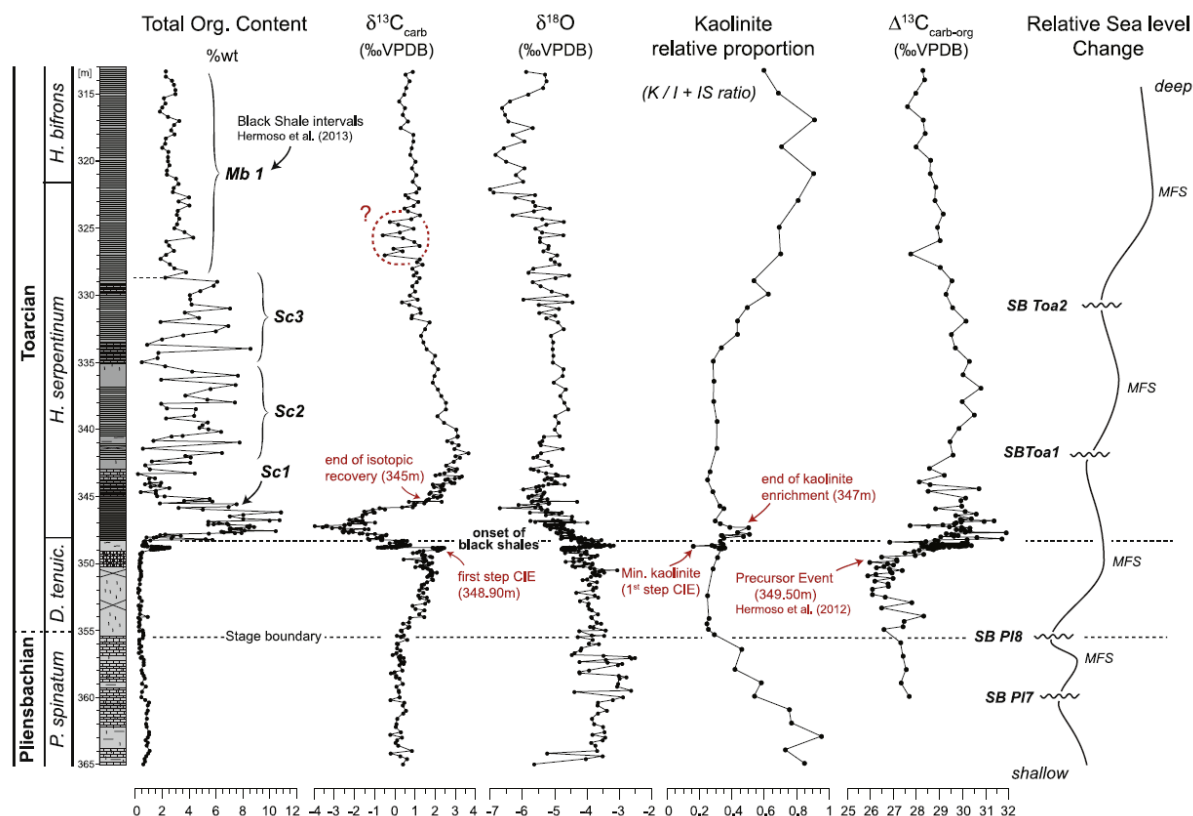


Fig. 2. Distribution du TOC, $\delta^{13}\text{C}$, $\delta^{18}\text{O}$, proportion en Kaolinite et courbe des variations du niveau marin relatif pour le Toarcien inférieur-moyen de forage de Couy-Sancerre (d'après Hermoso et Pellenard, 2014).

Malgré les nombreuses études portant sur cet intervalle, aucune analyse palynofaciès n'a été réalisée. Par ailleurs, seuls de fines portions ont été analysées par Rock-Eval (e.g. 348 à 349 m ; Hermoso et al., 2012), le reste des valeurs de TOC ont été déterminées par titration coulométrique via un Coulomat Strohllein 702. L'objectif de cette étude est d'examiner les modalités de l'enregistrement de la matière organique dans les dépôts sédimentaires de l'intervalle Pliensbachien supérieur – Toarcien moyen du forage de Couy-Sancerre à partir d'une analyse couplée des palynofaciès et de résultat de pyrolyse Rock-Eval.

3. Matériel et Méthode

30 échantillons avec un pas d'échantillonnage de ~1.5 m ont été prélevés sur l'intervalle Pliensbachie supérieur – Toarcien moyen (50m) afin d'effectuer la pyrolyse Rock-Eval et l'étude des palynofaciès.

La pyrolyse Rock-Eval est une méthode physico-chimique permettant une étude du contenu organique des roches développée par Espitalié et al. (1985). Les 30 échantillons ont été analysés dans les conditions standards détaillées par Behar et al. (2001) sur un appareil Rock-Eval 6.

Développée par [Combaz \(1964\)](#), la méthode des palynofaciès consiste à analyser par microscopie optique l'assemblage des particules de matière organique isolées de la roche sédimentaire par des attaques à l'HCl et à l'HF.

Les 30 échantillons ont été broyés et séchés à l'étuve à 40°C. Afin de détruire leur matrice minérale, trois traitements ont été effectués : un traitement à l'HCl à 33%, un traitement à l'HF à 70% et un dernier traitement à l'HCl à 33% bouillante. Aucun autre traitement n'a été réalisé afin de conserver un concentré organique résiduel le plus représentatif possible. Des lames ont été préparées avec les résidus totaux et filtrés à 10 µm. Les observations des lames palynologiques ont été effectuées avec un microscope Axioplan2 Imaging Zeiss sous lumière transmise et sous excitation aux UV (Zeiss HBO 100 Microscope Illuminating System, mercury short-arc lamp). La distinction des différentes catégories des composants du palynofaciès est basée sur leur origine, leur taille, leur couleur et une estimation de leur proportion relative dans l'assemblage a été conduite en suivant les méthodes développées par [Combaz \(1980\)](#) et [Tyson \(1995\)](#). 1000 unités de surface ont été comptées par lame filtrée afin d'estimer la proportion relative de chaque fraction organique.

4. Résultats

4.1. Pyrolyse Rock-Eval

Les valeurs de T_{max} varient de 414 à 430 °C sur l'ensemble de l'intervalle étudié ([Table 1](#)), ce qui indique un très faible degré de maturation thermique, en accord avec les études antérieures ([Disnar et al., 1996](#)).

D'une manière générale, les variations quantitatives de la matière organique peuvent respectivement être appréciées par l'évolution des teneurs en carbone organique (TOC) et les valeurs de l'index d'hydrogène correspondantes (IH) ([Espitalié et al., 1985](#)). L'allure graduelle des fluctuations de ces deux paramètres le long de l'intervalle Pliensbachien supérieur - Toarcien moyen a permis de subdiviser celui-ci en 6 zones au sein desquelles leurs valeurs respectives ne varient qu'assez peu ([Table 1](#) et [Fig. 3](#)).

Les teneurs en matière organique (TOC), ainsi que sa qualité (IH), sont très faibles, respectivement 0,7 wt % et 72 mg HC.g⁻¹ TOC en moyenne, durant l'intervalle 1 (zone à *P. spinatum* et *D. tenuicostatum*). Une importante et rapide augmentation a lieu pendant l'intervalle 2 (fin de la zone à *D. tenuicostatum*), et les valeurs de TOC et d'IH culminent à 8,6 wt % et 584 mg HC.g⁻¹ TOC dans la base de la zone à *H. serpentinum* (respectivement 6,3 et 459 de moyenne sur l'intervalle). L'intervalle 3, épais d'environ 2 m, est marqué par une chute du TOC et de l'IH avec des moyennes à 1,2 wt % et 170 mg HC.g⁻¹ TOC. L'intervalle 4 présente une rapide augmentation des valeurs de TOC et d'IH qui vont ensuite se maintenir jusqu'à la fin de l'intervalle 5 (moyennes de 4,3 wt % et 336 mg HC.g⁻¹ TOC pour l'intervalle 4 et 5,1 wt % et 400 mg HC.g⁻¹ TOC pour l'intervalle 5). Ces valeurs diminuent légèrement dans l'intervalle 6 (fin de la zone à *H. serpentinum* et début de la zone à *H. bifrons*) pour atteindre des moyennes de 2,5 wt % et 285 mg HC.g⁻¹ TOC.

Cote (m)	TOC (wt%)	HI (mg HC.g ⁻¹ TOC)	T _{max} (°C)	Interval
315	2,78	291	428	6
317	2,97	348	428	
319	1,81	247	430	
321	2,29	275	426	
323	2,78	294	428	
325	2,26	251	427	
327	2,28	279	424	
329	4,29	359	428	5
331	6,16	453	425	
333	5,56	379	425	
335	4,49	408	427	
336.1	3,71	358	427	4
337	5,90	377	421	
339	6,83	448	423	
341	0,94	161	427	
343	1,55	269	426	3
344	0,88	66	416	2
345.1	2,75	238	420	
346.2	8,62	584	414	
347	7,53	555	417	
349.2	0,56	54	417	1
350.1	0,47	67	421	
353	0,55	67	424	
354.8	0,40	42	422	
357	0,48	50	417	
359	1,48	119	428	
361	0,94	112	430	
363	0,86	70	425	
356	0,59	67	429	

Table 1. Contenu en matière organique (TOC), indice hydrogène (HI) et T_{max} de l'intervalle Pliensbachien supérieur – Toarcien moyen du forage de Couy-Sancerre.

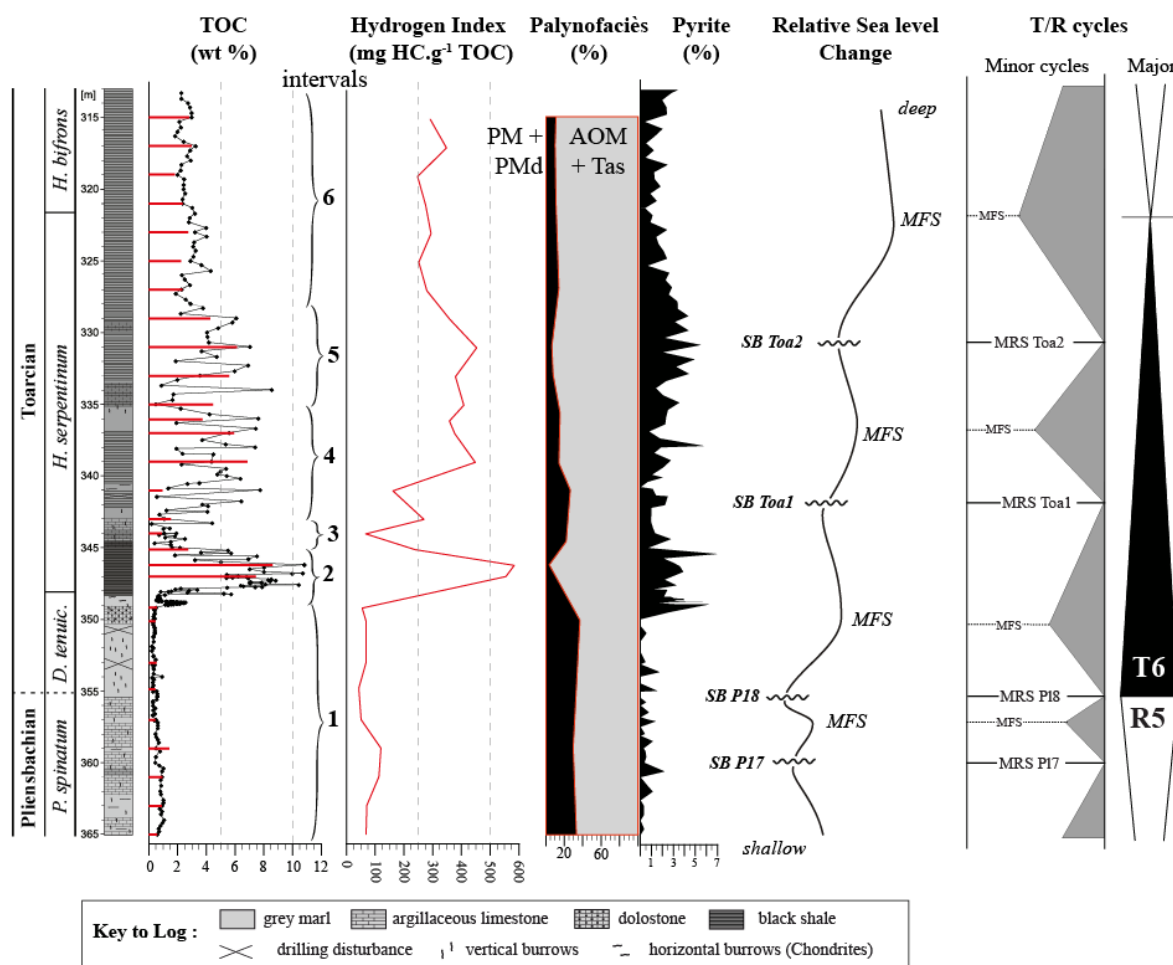


Fig. 3. Distribution verticale du TOC et de l'IH de l'intervalle Plensbachien supérieur-base du Toarcien moyen du forage de Couy-Sancerre. Les données en rouge proviennent de cette étude et correspondent aux échantillons également analysés pour leur palynofaciès (modifié de Hermoso et Pellenard, 2014).

4.2. Analyse des palynofaciès

Sept types de constituants ont été reconnus et individualisés selon des critères d'origine, de morphologie et de texture dans les échantillons étudiés (Fig. 4). La classification utilisée est celle proposée par Whitaker (1984) et modifiée par Gorin et Steffen (1991).

- 1) Matière Organique Amorphe (MOA) : Il s'agit de matière organique amorphe gélifiée, floconneuse, sans structure interne et dont la couleur est orange à rouge en lumière transmise et avec une légère fluorescence jaune. Ces particules peuvent atteindre une grande taille dépassant plusieurs centaines de μm .
- 2) Débris de Matière Organique Amorphe (dMOA) : Il s'agit de MOA fragmentée ou sous forme de débris et la fluorescence est quasi-nulle.
- 3) Palynomacéraux (PM) : Il s'agit de fragments bruns et parfois légèrement translucides dérivant de tissus ligno-cellulosiques. Leur forme varie d'équidimensionnelle à aciculaire. Des microstructures biologiques sont encore parfois visibles et identifiables (ponctuations dans les

vaisseaux, fibres trachéides, etc.). Leur taille varie d'une dizaine à plusieurs centaines de μm pour les fragments aciculaires les plus longs.

4) Palynomacéraux dégradés (PMd) : Il s'agit de fragments noirs, opaques et dégradés, sans structures biologiques identifiable. Leur forme varie d'equidimensionnelle à aciculaire et leurs contours sont anguleux et plus ou moins corrodés. Leur taille varie d'une dizaine à plusieurs centaines de μm pour les plus longs fragments aciculaires.

5) Pollen (Pol) : Il s'agit dans la plupart des lames de grains de pollen bissaccates dont la forme présente plusieurs sphères ovoïdes. Jaune et en partie translucide en lumière transmise, leur couleur est orange vive en fluorescence. Ces particules ont une taille de l'ordre de 5 à 30 μm .

6) Tasmanacée (T) : Il s'agit de kystes d'algues vertes marines de la famille des Prasynophycées. Leur forme est sphérique et présente un bourrelet sur la bordure (50 à 300 μm). Leur couleur est orange et légèrement translucide sur la bordure en lumière transmise.

7) Pyrite (Pyr) : Il s'agit de petits grains de pyrite isolés ou en amas. Leur forme est généralement circulaire (5 à 25 μm) ce qui suggère qu'il s'agit de pyrites framboïdales, formées lors de la diagenèse précoce dans le sédiment. Ces particules sont entièrement opaques en lumière réfléchie et transmise.

Les proportions relatives de ces constituants le long de l'intervalle Pliensbachien supérieur – Toarcien moyen sont présentées dans la [Fig. 3](#).

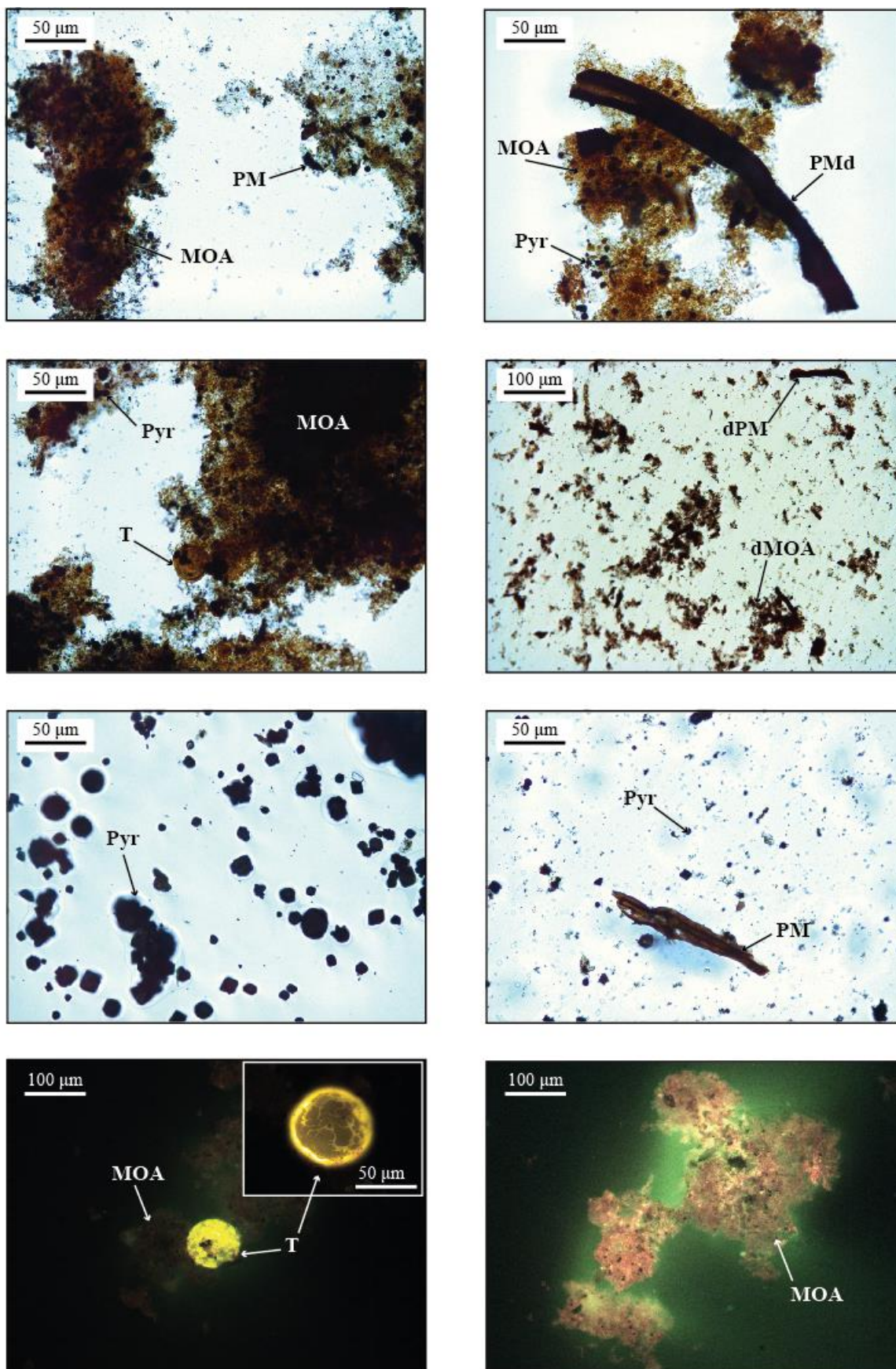


Fig. 4. Exemple d'éléments identifiés selon les critères d'origine, de morphologie et de texture dans les échantillons étudiés.

5. Discussion

Les valeurs de $T_{\max}$ varient de 414 à 430 °C sur l'ensemble de l'intervalle étudié témoignant de l'immaturité générale de la matière organique (fin de diagenèse) (Espitalié et al., 1985).

Les données de l'analyse palynofaciès conforte les subdivisions de la série basés sur les données de pyrolyse. Elles permettent également de préciser l'origine de la matière organique, voire des conditions de sédimentation. Au début du Toarcien (intervalle 2, fin de la zone à *D. tenuicostatum*), le passage à de meilleures conditions de préservation de la matière organique se marque pas une augmentation de la MOA et des dMOA, qui s'accompagne aussi par des valeurs plus élevées du TOC (~5,6 wt %) et de l'IH (~387 mg HC.g⁻¹ TOC) (Table 1), valeurs comparables à celles mesurées par Disnar et al. (1996) dans le nord du bassin de Paris. Cette augmentation de la quantité et de la proportion de MOA est due à l'accumulation du matériel planctonique provenant notamment de la dégradation d'algues Tasmanacées (Durand et al. 1972 ; Alpern et Cheymol, 1978 ; Disnar et al., 1996).

En regard des valeurs de TOC et d'IH et des proportions de matériel organique terrigène, il semble que des apports terrestres aient eu lieu tout au long de l'intervalle Pliensbachien supérieur – Toarcien inférieur. La grande proportion de palynomacéraux aciculaires et de pollens bissaccates laissent à penser que ces sources étaient relativement lointaines. Sur cet enregistrement de fond, viennent s'ajouter des apports importants de matériel organique planctonique. Deux facteurs potentiels peuvent justifier de cette accumulation de matériel organique : une forte productivité primaire et/ou une préservation de la matière organique assurée par un milieu anoxique.

La présence de pyrite, intimement associée à la matière organique, révèle le caractère réducteur du milieu de dépôt dès le Pliensbachien supérieur (intervalle 1). Divers facteurs ont pu contribuer au développement de cet environnement favorable à la conservation de la matière organique. Les connections du bassin de Paris avec les bassins voisins sous la forme de seuils et les faibles paleobathymétries, ont certainement limité le développement de courants de fond, limitant ainsi le renouvellement de l'oxygène des eaux profondes. De plus, les apports de matière organique eux-mêmes ont pu entretenir et accentuer l'anoxie par consommation de l'oxygène. En outre, la proportion de pyrite et les valeurs d'IH et du TOC sont corrélables sur tout l'intervalle étudié (Fig. 3). Ces observations suggèrent que l'augmentation de productivité primaire et donc, de l'apport en matière organique, aurait contribué à la déplétion en oxygène (augmentation de la proportion de pyrite) et diluant ainsi la proportion de matériel organique terrigène. La forte productivité primaire aurait ainsi contribué au développement de l'anoxie agissant à son tour comme un facteur positif pour la conservation de la matière organique.

L'origine de l'augmentation de la productivité primaire reste incertaine. La proximité du massif Central et son ennoiment progressif pendant le Pliensbachien – Toarcien (Enay et Mangold, 1980) ainsi que l'augmentation de l'altération continentale (Hermoso et Pellenard, 2014) auraient pu contribuer à la mobilisation massive de nutriments. La prolifération planctonique pourrait également résulter d'une augmentation de la température et de l'insolation. Cependant une augmentation de la température semble peu probable pour le développement des Tasmanacées qui semblent plus aptes à proliférer en milieu frais (Péniguel et al., 1989). Par ailleurs, les Tasmanacées affectionnant les milieux saumâtres (Péniguel et al., 1989), il est également possible que des forts apports d'eau douce aient pu contribuer au développement d'un milieu hyposalin.

6. Conclusion

Les résultats de cette étude, en accord avec les travaux de [Wignall \(1991\)](#) et [Disnar \(1996\)](#), suggèrent que les dépôts riches en matière organique du Toarcien inférieur et moyen du bassin de Paris résulteraient d'une convergence de facteurs clés : une augmentation de la production primaire associée à la prolifération des algues Tasmanacées en milieu marin peu profond et sur une paléogéographie structurée. La déplétion en oxygène du milieu et le développement de l'anoxie, conséquence de l'augmentation de la production primaire, auraient contribué à la conservation et à l'accumulation de ces niveaux riches en matière organique.

Les causes de l'augmentation de la productivité primaire restent incertaines. En outre, cette étude met en avant la nécessité d'apporter un aspect quantitatif sur le rôle relatif de la productivité primaire afin de déterminer le seuil à partir duquel la quantité de matière organique apportée au sédiment et la déplétion en oxygène en résultant permettent le dépôt de niveaux au potentiel pétrologène élevé.

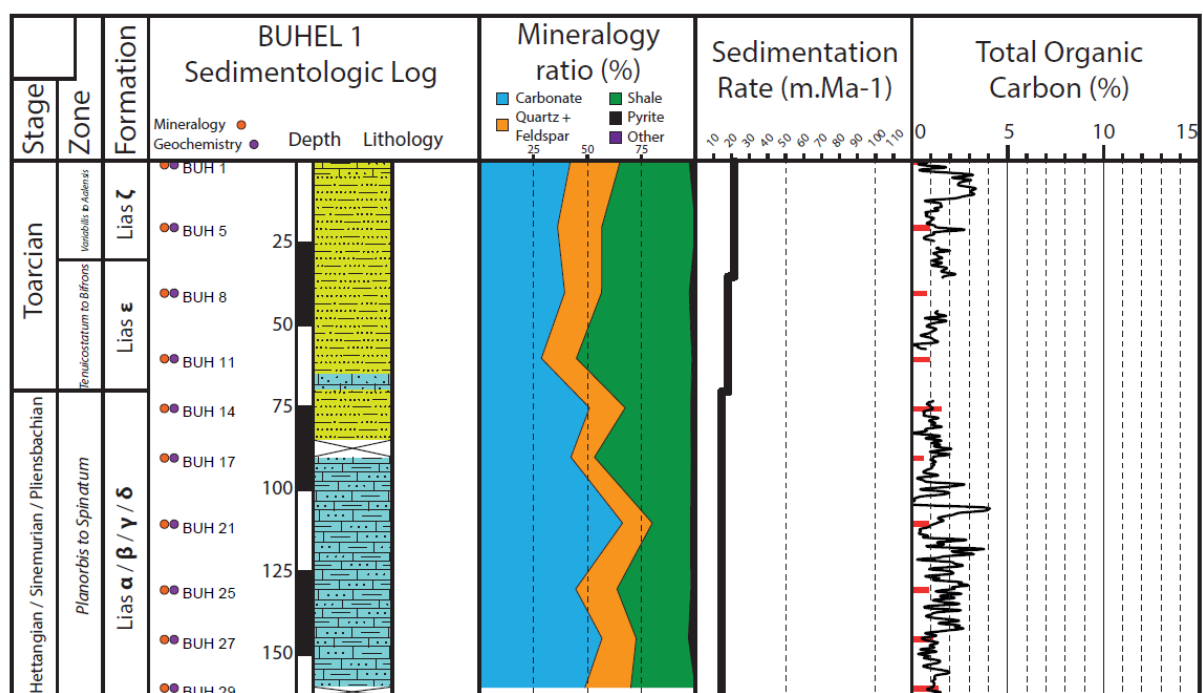
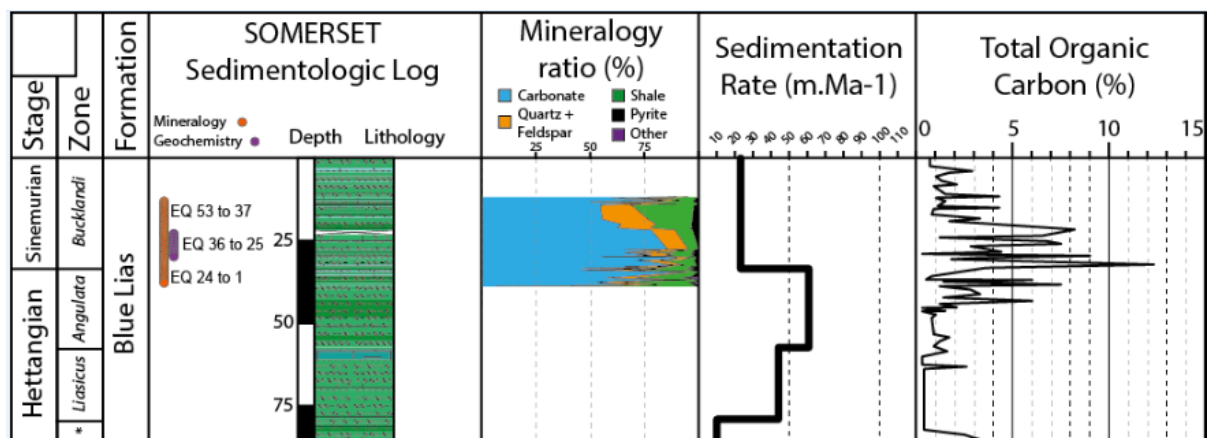
ANNEXE 2 : Exemple de données de pyrolyse Rock-Eval

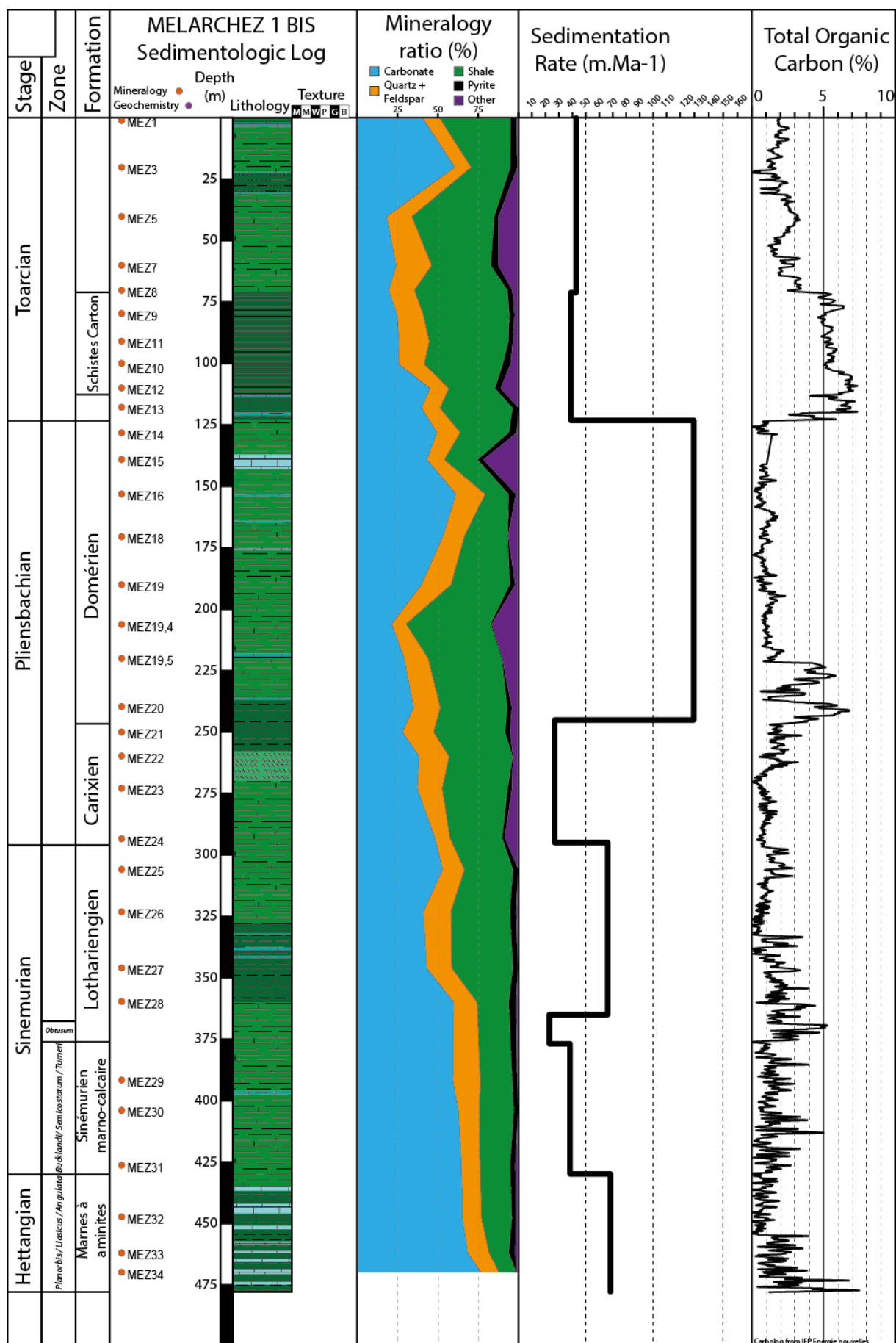
Well / Section	cote	Sample	S1 (mg/g)	S2 (mg/g)	Tmax (°C)	TOC (%)	HI	OI
VIOLS LE FORT	2015	VLf 1	0,05	0,09	387	0,51	18	186
VIOLS LE FORT	1911	VLf 2	0,09	0,25	438	0,72	35	142
VIOLS LE FORT	1910	VLf 3	0,09	0,28	457	0,73	38	64
VIOLS LE FORT	1828	VLf 4	0,14	0,37	446	0,75	49	124
VIOLS LE FORT	1730	VLf 5	0,17	0,66	434	0,96	69	178
VIOLS LE FORT	1635	VLf 6	0,15	0,57	430	0,84	68	132
VIOLS LE FORT	1632	VLf 7	0,11	0,24	435	0,75	32	96
VIOLS LE FORT	1630	VLf 8	0,2	0,68	432	0,85	80	172
VIOLS LE FORT	1590	VLf 9	0,22	0,59	427	0,95	62	178
VIOLS LE FORT	1510	VLf 10	0,26	0,88	438	0,89	99	124
VIOLS LE FORT	1480	VLf 11	0,27	0,82	432	0,88	93	164
VIOLS LE FORT	1420	VLf 12	0,22	1,03	438	0,82	126	55
VIOLS LE FORT	1380	VLf 13	0,24	1,04	437	1,03	101	160
VIOLS LE FORT	1285	VLf 14	0,34	1,2	434	0,98	122	128
VIOLS LE FORT	1253	VLf 15	0,19	1,32	434	0,91	145	125
VIOLS LE FORT	1155	VLf 16	0,19	0,83	428	0,79	105	180
VIOLS LE FORT	1154	VLf 17	0,25	1,5	433	1,04	144	105
PLAYA DE VEGA		PdV 1	0,85	10,25	450	7,94	129	7
PLAYA DE VEGA		PdV 2	0,51	3,84	448	4,23	91	17
PLAYA DE VEGA		PdV 3	0,53	4,16	451	4,95	84	17
PLAYA DE VEGA		PdV 4	0,58	4,56	450	4,88	93	11
PLAYA DE VEGA		PdV 5	0,25	1,27	440	1,53	83	70
PLAYA DE VEGA		PdV 6	0,81	4,96	451	5,4	92	23
PLAYA DE VEGA		PdV 7	0,7	5,78	452	5,32	109	27
PLAYA DE VEGA		PdV 8	0,37	2,63	448	2,85	92	29
PLAYA DE VEGA		PdV 9	0,08	0,2	439	0,91	22	225
PENICHE		PoPe15	0,13	0,76	430	1,37	55	104
PENICHE		PoPe16	0,07	1,11	435	1,19	93	115
PENICHE		PoPe17	0,07	0,31	429	0,42	74	214
PENICHE		PoPe18	0,05	0,47	431	1,11	42	339
PENICHE		PoPe19	0,15	5,25	433	3,33	158	84
PENICHE		PoPe20	0,19	3,27	429	1,84	178	58
PENICHE		PoPe21	0,1	5,83	431	2,59	225	41
PENICHE		PoPe22	0,2	15,67	429	4,14	379	24
PENICHE		PoPe23	0,1	6,94	429	3,01	231	39
PENICHE		PoPe24	0,13	2,7	433	1,79	151	44
PENICHE		PoPe25	0,21	14,64	424	4,21	348	28
PENICHE		PoPe26	0,13	7,2	430	2,86	252	73
PENICHE		PoPe27	0,38	34,37	425	7,52	457	42
PENICHE		PoPe29	0,16	13,77	424	3,88	355	35
PENICHE		PoPe30	0,11	9,21	428	3,39	272	69

Well / Section	cote	Sample	S1 - (mg/g)	S2 - (mg/g)	Tmax (°C)	TOC (%)	HI	OI
PENICHE		PoPe31	0,06	1,7	432	1,61	106	134
PENICHE		PoPe32	0,09	6,19	434	2,91	213	104
PENICHE		PoPe33	0,18	13,97	428	4,81	290	60
PENICHE		PoPe34	0,06	0,57	423	1,35	42	173
PENICHE		PoPe35	0,06	0,99	429	1,72	58	141
PENICHE		PoPe36	0,09	5,07	434	2,52	201	111
PENICHE		PoPe37	0,09	2,19	435	1,98	111	130
PENICHE		PoPe28	0,07	0,77	423	1,58	49	189
MARGE ARDECHOISE		SE 1	0,11	1,66	433	0,94	177	133
MARGE ARDECHOISE		SE 2	0,05	0,8	434	0,44	182	234
MARGE ARDECHOISE		SE 3	0,08	0,26	475	0,74	35	62
MARGE ARDECHOISE		SE 4	0,08	0,31	434	0,64	48	106
MARGE ARDECHOISE		SE 5	0,06	0,33	436	0,64	52	119
MARGE ARDECHOISE		SE 6	0,08	0,61	439	0,52	117	175
MARGE ARDECHOISE		SE 7	0,06	0,4	455	0,32	125	216
MARGE ARDECHOISE		SE 8	0,05	0,2	379	0,11	182	1082
MARGE ARDECHOISE		SE 9	0,03	0,07	384	0,04	175	1300
SANCERRE	315	S315	0,14	8,09	428	2,78	291	68
SANCERRE	317	S317	0,21	10,34	428	2,97	348	99
SANCERRE	319	S319	0,08	4,33	430	0,43	1007	263
SANCERRE	323	S323	0,13	8,17	428	2,78	294	67
SANCERRE	325	S325	0,1	5,68	427	2,26	251	74
SANCERRE	327	S327	0,12	6,37	424	2,28	279	96
SANCERRE	329	S329	0,21	15,44	427	4,28	361	71
SANCERRE	331	S331	0,52	27,93	425	6,16	453	62
SANCERRE	333	S333	0,52	21,1	425	5,56	379	86
SANCERRE	335	S335	0,36	18,31	427	4,49	408	79
SANCERRE	336,1	S336.1	0,2	13,3	427	3,71	358	75
SANCERRE	337	S337	0,42	22,27	421	5,9	377	67
SANCERRE	339	S339	0,53	30,61	423	6,83	448	74
SANCERRE	341	S341	0,08	1,51	427	0,94	161	296
SANCERRE	343	S343	0,11	4,17	426	1,55	269	228
SANCERRE	344	S344	0,06	0,58	416	0,88	66	238
SANCERRE	345,1	S345.1	0,22	6,54	420	2,75	238	208
SANCERRE	346,2	S346.2	0,86	50,36	414	8,62	584	48
SANCERRE	347	S347	0,64	41,8	417	7,53	555	32
SANCERRE	349,2	S349.2	0,06	0,3	417	0,56	54	650
SANCERRE	350,12	S350.12	0,08	0,32	421	0,48	67	535
SANCERRE	353	S353	0,06	0,37	424	0,55	67	420
SANCERRE	354,8	S354.8	0,05	0,17	422	0,4	42	670
SANCERRE	357	S357	0,08	0,24	417	0,48	50	640
SANCERRE	359	S359	0,15	1,76	428	1,48	119	300
SANCERRE	361	S361	0,09	1,05	430	0,94	112	167
SANCERRE	363	S363	0,07	0,6	425	0,86	70	206

Well / Section	cote	Sample	S1 - (mg/g)	S2 - (mg/g)	Tmax (°C)	TOC (%)	HI	OI
SANCERRE	365	S365	0,05	0,39	429	0,58	67	1166
EAST QUANTOXHEAD		EQ25	0,1	1,01	428	0,69	146	164
EAST QUANTOXHEAD		EQ26	1,88	60,19	423	12,09	498	21
EAST QUANTOXHEAD		EQ27	0,33	8,98	420	3,21	280	69
EAST QUANTOXHEAD		EQ28	0,27	7,72	422	2,57	300	74
EAST QUANTOXHEAD		EQ29	0,15	3,98	424	1,66	240	147
EAST QUANTOXHEAD		EQ30	0,12	4,41	423	1,73	255	86
EAST QUANTOXHEAD		EQ31	0,03	8	424	3,01	266	32
EAST QUANTOXHEAD		EQ32	0,27	9,25	421	2,89	320	53
EAST QUANTOXHEAD		EQ32	0,27	9,46	422	2,93	323	51
EAST QUANTOXHEAD		EQ33	0,19	5,32	424	1,86	286	70
EAST QUANTOXHEAD		EQ34	0,12	2,23	429	2,01	111	99
EAST QUANTOXHEAD		EQ35	0,06	1,44	426	0,78	185	144
EAST QUANTOXHEAD		EQ36	0,07	1,01	430	0,65	155	154

ANNEXE 3 : Exemple d'étude de forage – coupe





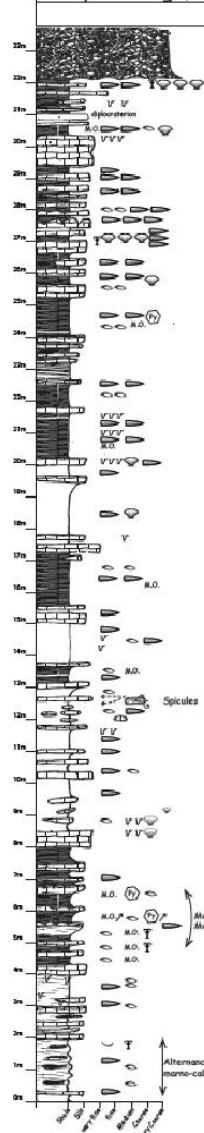
ANNEXE 4 : Planche d'étude de terrain – carothèque

Planche 1.



↑ Section Playa de Vega, Espagne

Playa de Vega, Espagne



↑ Niveau coquiller dans des niveaux riches en matière organique et → variations de TOC mesuré dans le Pliensbachien, Playa de Vega



↓ Alternances marno-calcaires avec des horizons riches en matière organique, Playa de Vega

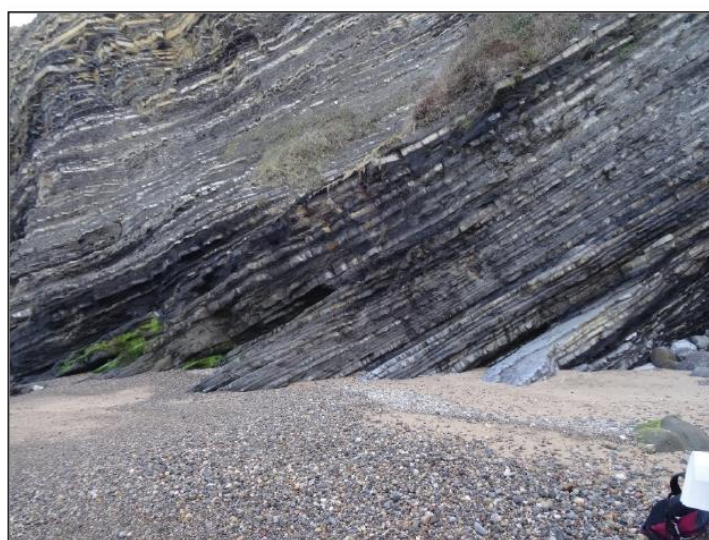


Planche 1 : Bassin Cantabrien. Coupes de Playa de Vega et Punta de las Llastres (Espagne, avril 2014).

Planche 2.

Sinémurien de la section de Peniche,
Portugal ➡



← Alternances marno-calcaires du
Pliensbachien, Peniche



↙ Ammonites du
Sinémurien,
Sao Pedro de Moel



← Banc oolithique toarcien
avec débris de crinoïdes,
Peniche

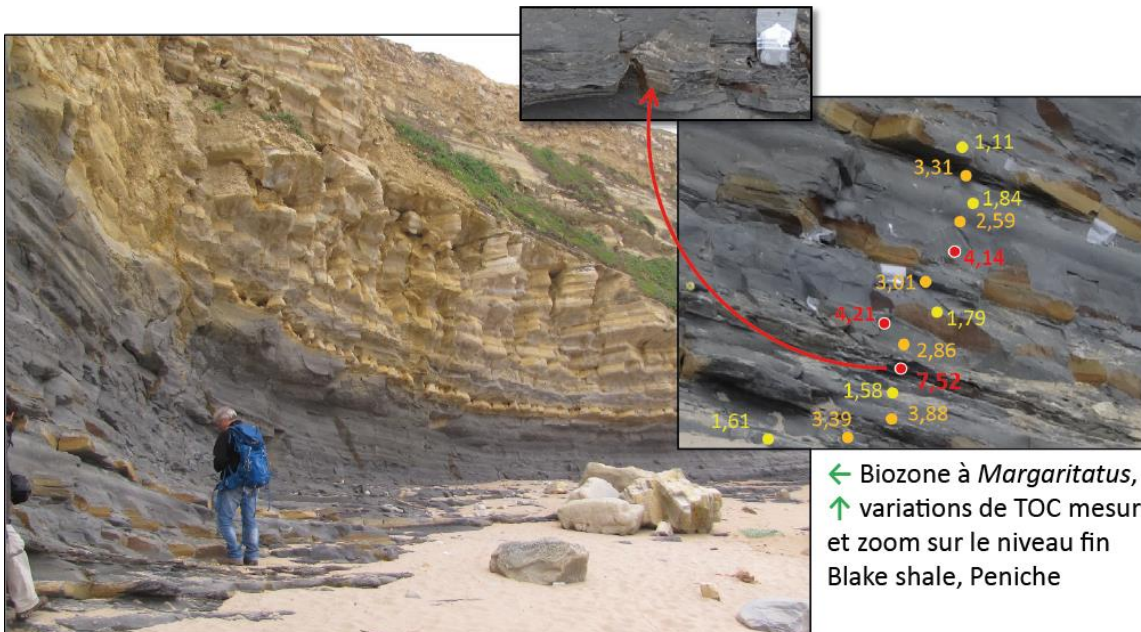


Planche 2 : Bassin Lusitanien. Coupes de Peniche, Sao Pedro de Moel, Tomar, Rabaçal et Figueira da Foz (Portugal, avril 2014).

Planche 3.



↑ Dépôts proximaux clastiques
avec fragments de crinoïdes du
Pliensbachien, marge ardéchoise

← Black shale, Combe de Morties

↓ Niveau Black shale,
section de Soubès



← Eau toarcienne
récoltée dans les marnes
toarciennes, tunnel de
Tournemire



← Etude IRSN des propriétés de confinement de la
roche argileuse toarcienne et des performances de
stockage dans le but d'assurer une expertise
indépendante de l'Andra

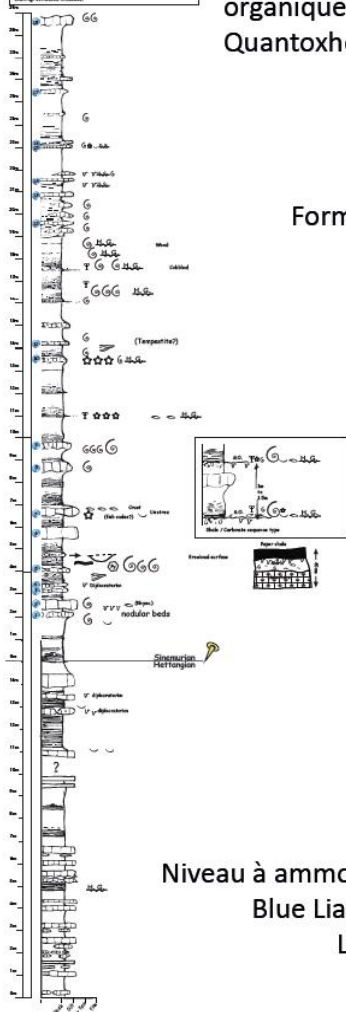
Planche 3 : Bassin du Sud-Est. Affleurements de la marge ardéchoise et du bassin des grands Causses (France, mai 2014).

Planche 4.



↑ Limite Hettangien – Sinémurien,
GSSP East-Quantoxhead

Quantoxhead East
Blue Lias



↑ Lag coquiller à la base d'un niveau
« paper shale » riche en matière
organique du Sinémurien, East-
Quantoxhead

Formation toarcienne des Bridport
Sandstone, West Bay →



Niveau à ammonites dans le
Blue Lias hettangien,
Lyme Regis →

Planche 4 : Bassin du Wessex. Affleurements du Dorset et Somerset (Royaume-Uni, juillet 2014).

Planche 5.



↑ Section de Robin Hood's Bay - Whitby, Yorkshire



↑ Niveau riche en coquilles de moules,
Grey shale Member

Ammonite pyritisée →
et bélemnites,
Grey shale Member, ↓



Figures sédimentaires
hummocks dans la Formation Whitby ↓↘



Planche 5 : Bassin de Cleveland. Affleurements du Yorkshire (juillet 2014).

Planche 6.



←← Carottes du Toarcien du Graben du Rhin, carothèque de Lingen

← Carottes de l'Hettangien du seuil du Poitou, carothèque de Mareuil sur Ourcq

Ammonite dans une carotte du Toarcien du seuil du Poitou, carothèque de Mareuil sur Ourcq →



Etude de carotte, carothèque de Mareuil sur Ourcq ↓



Broyage des échantillons pour la pyrolyse Rock-Eval, laboratoire de l'ISTeP ↗→



← Echantillonnage de cuttings, carothèque de Lingen



Planche 6 : Bassin de Paris et bassin Souabe. Visite en carothèques patrimoniales de ENGIE et de ses filiales, Storengy (Mareuil sur Ourcq, France) et DEXpro (Lingen, Allemagne).