

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Факультет геології, географії, рекреації та туризму
Кафедра фундаментальної та прикладної геології

До захисту перед ЄК допущено
В.о. зав. кафедри _____ доц. Петік В.О.
«_____» _____ 2025 року

**«Побудова 3D-моделей накопичення рідкісних та розсіяних елементів
у бурому вугіллі»**

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА МАГІСТРА

Виконав:

студент 2 курсу, група ГЛ-21-з,
спеціальність 103 Науки про Землю,
освітньо-професійна програма
«геологія»

Подрєзов Костянтин Михайлович

Керівник:

к. геол.-мін. н., доцент

Горайнов Сергій Володимирович

*Кваліфікаційна робота захищена
з оцінкою «_____»*

_____ *Голова ЄК Безрук К.О.*

_____ *Секретар ЄК Тищенко І.І.*

«_____» _____ 2025 року

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка містить **56** сторінок, включає **6** розділів, **6** таблиць **43** джерела за переліком посилань.

Робота присвячена геологічному моделюванню просторового розподілу рідкоземельних елементів (РЗЕ) у лігнітних вугіллях басейну Віллістон (Північна Дакота, США) на прикладі вугільного пласта Nagel. Актуальність дослідження визначається високим глобальним попитом на РЗЕ як стратегічну сировину для високотехнологічних, енергетичних та оборонних галузей США, які залишаються імпортозалежними щодо цих матеріалів.

Об'єкт розроблення — лігнітні вугілля басейну Віллістон.

Предмет розроблення — просторовий розподіл рідкоземельних елементів у вугільних пластах та методи їх тривимірного геологічного моделювання.

Мета роботи — розробити методологію 3D геологічного моделювання концентрацій РЗЕ у лігнітному пласті Nagel та оцінити їх потенційно економічно відновлювані об'єми.

Для досягнення мети застосовано такі методи: аналіз літератури та відкритих геологічних даних; використання даних свердловинного опису та геофізики; статистичний аналіз концентрацій РЗЕ; методи просторової інтерполяції та геостатистики; побудова структурної моделі й моделі властивостей у 3D. Використано інструменти геологічного моделювання для трендового аналізу, розподілів концентрацій та просторової візуалізації TREE.

Результати та їх новизна.

Вперше для пласта Nagel створено детальну тривимірну модель розподілу РЗЕ, що включає структурне моделювання, моделювання трендів та оцінку об'ємів TREE для різних частин пласта. Побудовані об'ємні моделі концентрацій дозволили визначити просторові закономірності нагромадження РЗЕ та виділити ділянки з підвищеним економічним потенціалом. Отримані середні концентрації TREE та маси індивідуальних REE (табл. 5–6) дозволили оцінити можливість їх відновлення як стратегічної сировини.

Значення роботи та висновки.

Розроблена методологія підвищує точність оцінки просторового розподілу РЗЕ у вугіллі, створює основу для визначення економічно перспективних зон та може використовуватися у ширших геолого-економічних оцінках.

Прогнозні припущення.

Подальший розвиток дослідження передбачає використання більшої кількості лабораторних аналізів, інтеграцію із сейсмічними даними, удосконалення геостатистичних алгоритмів та створення регіональних 3D моделей РЗЕ.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: РІДКІЗОЗЕМЕЛЬНІ ЕЛЕМЕНТИ, ВУГІЛЛЯ, ЛІГНІТ, 3D МОДЕЛЮВАННЯ, BASIN WILLISTON, TREE, ГЕОЛОГІЧНА МОДЕЛЬ, РОЗПОДІЛ РЗЕ.

ЗМІСТ

ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1. АНАЛІЗ ЛІТЕРАТУРНИХ ДАНИХ ТА ОСНОВИ ГЕОЛОГІЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ РІДКОЗЕМЕЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ У ЛІГНІТНИХ ВУГІЛЛЯХ	6
1.1. Рідкоземельні елементи та їх значення як стратегічної сировини	7
1.2 Регіональні умови	11
1.3 Територія дослідження	12
1.4 Методи.....	14
1.5 Попередні дослідження	15
РОЗДІЛ 2. ОГЛЯД РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ.....	17
2.1 РЗЕ у вугіллі	17
2.2 Розподіл РЗЕ у вугіллі	18
РОЗДІЛ 3. ГЕОЛОГІЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА РАЙОНУ ДОСЛІДЖЕННЯ	20
3.1 Fort Union	20
3.2 Вугільний пласт Nagel.....	23
РОЗДІЛ 4. ДАНІ ТА ЇХ ХАРАКТЕРИСТИКИ	26
4.1 Попередні відбори та дослідження проб	26
4.2 Дані геофізичних та описових свердловинних матеріалів	27
РОЗДІЛ 5. 3D МОДЕЛЮВАННЯ.....	29
5.1 Вихідні дані	29
5.2 Структурне моделювання	31
5.3 Моделювання властивостей.....	36
5.3.1 Trend Modeling (моделювання трендів).....	37
5.3.2 Distribution (розповсюдження)	39
5.4 Аналіз та результати	41
РОЗДІЛ 6. АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ	48
ВИСНОВКИ	50
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	53

ВСТУП

Актуальність проблеми дослідження визначається зростаючою потребою у рідкоземельних елементах (РЗЕ) для високотехнологічних галузей, енергетичних систем та оборонної промисловості. Рідкоземельні елементи включають лантаноїдні елементи (з атомними номерами від 57 до 71) разом з ітрієм (Y) та скандієм (Sc). Незважаючи на відносну поширеність у земній корі, РЗЕ рідко зустрічаються у концентраціях, що дозволяють їх економічно видобувати. На сьогоднішній день США повністю імпортозалежні від цих стратегічних матеріалів, що ставить проблему постачання РЗЕ в розряд питань національної безпеки.

Одним із перспективних джерел РЗЕ є вугілля та його побічні продукти. Попередні дослідження показали, що лише в межах США потенційно «неусвідомлено» виробляється до 40 000 метричних тонн РЗЕ щорічно з існуючого видобутку вугілля. Особливо цікавим є лігніт в басейні Віллістон (штат Північна Дакота), який містить концентрації РЗЕ, що перевищують мінімальний поріг 300 ppm, встановлений Міністерством енергетики США для економічно доцільного видобутку. Водночас дослідження просторового розподілу РЗЕ у вугільних пластах, зокрема у тривимірній моделі, залишаються недостатньо розвиненими, що обмежує точність оцінки потенційних запасів.

Метою даної кваліфікаційної роботи є розробка методології тривимірного геологічного моделювання розподілу рідкоземельних елементів у лігнітних вугіллях на прикладі вугільного пласта Hagel у басейні Віллістон (Північна Дакота), з оцінкою їх потенційно економічно відновлюваних концентрацій.

Для досягнення мети поставлено наступні завдання:

1. Провести огляд літературних джерел щодо поширення та концентрації РЗЕ у вугіллі США, особливо у басейні Віллістон.
2. Зібрати та систематизувати дані щодо складу та вертикального розподілу РЗЕ у пласті Hagel.

3. Розробити 3D геологічну модель вугілля з урахуванням просторового розподілу РЗЕ.

4. Провести оцінку потенційно відновлюваних концентрацій РЗЕ у моделюваному пласті.

5. Надати рекомендації щодо можливого використання отриманих результатів у плануванні видобутку РЗЕ.

Об'єктом дослідження є лігнітні вугілля басейну Віллістон, а предметом – розподіл рідкоземельних елементів у вугільних пластах та їх тривимірне моделювання для оцінки потенційно економічно доцільного видобутку.

Методологічною основою роботи стали принципи геологічного моделювання, аналізу хімічного складу вугілля та методи оцінки запасів мінеральної сировини. Практичне значення полягає у можливості використання розробленої методики для планування видобутку РЗЕ у лігнітних пластах та оцінки їх потенційної економічної ефективності.

Особистий внесок магістранта полягає у розробці та апробації методики 3D моделювання просторового розподілу РЗЕ у конкретному вугільному пласті на основі відкритих та приватних геологічних даних. Результати роботи можуть бути використані у наукових дослідженнях та промислових проектах з видобутку та переробки рідкоземельних елементів.

Наукова новизна роботи полягає у застосуванні тривимірного геологічного моделювання для оцінки концентрацій РЗЕ у вугіллі та аналізі їх просторового розподілу у межах конкретного вугільного пласта.

РОЗДІЛ 1.

АНАЛІЗ ЛІТЕРАТУРНИХ ДАНИХ ТА ОСНОВИ ГЕОЛОГІЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ РІДКОЗЕМЕЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ У ЛІГНІТНИХ ВУГІЛЛЯХ

Рідкоземельні елементи (РЗЕ) становлять окрему групу хімічних елементів із унікальними фізико-хімічними властивостями. До них належать лантаноїдні елементи (атомні номери 57–71), а також Yttrium (Y) і Scandium (Sc). Ці елементи широко використовуються у високотехнологічних виробках, енергетичних системах та оборонній промисловості. Незважаючи на поширеність у земній корі, РЗЕ рідко зустрічаються у концентраціях, що забезпечують економічно вигідний видобуток. У США сьогодні спостерігається повна імпортозалежність від рідкоземельних елементів, що визначає критичну потребу у вивченні альтернативних джерел цих матеріалів.

Одним із перспективних альтернативних джерел РЗЕ є вугілля та його побічні продукти. Аналіз наявних досліджень показує, що вугілля може містити концентрації рідкоземельних елементів, що перевищують економічно доцільний поріг у 300 ppm, визначений Міністерством енергетики США. Особливу увагу привертає лігніт басейну Віллістон у Північній Дакоті. Дослідження Kruger et al. (2017), Murphy et al. (2018) та Zygarlicke et al. (2019) показали, що проби лігніту у цьому регіоні містять потенційно економічно відновлювані концентрації РЗЕ. Загалом, за оцінками, щорічно в США може «неусвідомлено» вироблятися до 40 000 метричних тонн рідкоземельних елементів із поточного видобутку вугілля.

Вивчення розподілу РЗЕ у вугіллі зосереджено на визначенні концентрацій у пробах з найвищим вмістом елементів, що дозволяє оцінити потенційну економічну доцільність видобутку. Водночас просторовий розподіл РЗЕ у межах вугільних пластів, особливо їх вертикальна варіабельність, залишається недостатньо вивченим. Дослідження Laudal (2017), Murphy et al. (2018) та Kruger et al. (2017) показали, що концентрації

РЗЕ у лігніті не є рівномірними по товщині пласта: вищі значення спостерігаються поблизу контактів із покрівлею та підшоною, тоді як у центральній частині пласта вони значно нижчі.

Недостатня деталізація просторового розподілу РЗЕ обмежує можливість точних оцінок потенційних запасів та планування видобутку. З огляду на це, сучасні дослідження приділяють особливу увагу тривимірному геологічному моделюванню, що дозволяє враховувати не лише горизонтальні, але й вертикальні зміни концентрацій РЗЕ у вугільних пластах. Застосування методів 3D моделювання на прикладі пласта Nagel у басейні Віллістон показало, що навіть при обмежених даних можна створити структурну модель вугілля, оцінити розподіл РЗЕ та визначити потенційні обсяги економічно відновлюваних елементів.

Лігнітні вугілля привертають увагу через можливість високих концентрацій РЗЕ та наявність технологій їх вилучення із низькосортного вугілля. Згідно з даними Murphy et al. (2018), середній вміст РЗЕ у вугіллі світу на мінеральній основі складає 68,5 ppm, тоді як у вугіллі США – 62,1 ppm, або 517 ppm на основі золи. Це свідчить про потенційну економічну цінність лігніту у видобутку рідкоземельних елементів.

Таким чином, наукова література підтверджує перспективність лігнітних вугілля як джерела РЗЕ та підкреслює необхідність тривимірного моделювання для точнішого визначення їх розподілу у пластах. Це дозволяє ефективно планувати видобуток та оцінювати потенційну економічну доцільність використання РЗЕ з вугілля.

1.1. Рідкоземельні елементи та їх значення як стратегічної сировини

Рідкоземельні елементи (REE) становлять групу хімічних елементів із унікальними споживчими та технологічними властивостями. До них належать елементи лантанічного ряду з атомними номерами від 57 до 71, а також ітрії (Y) і скандій (Sc) (Figure 1). З хімічної точки зору їх поділяють на легкі

рідкоземельні елементи (LREEs) та важкі рідкоземельні елементи (HREEs), а з економічної – на критичні, некритичні та надлишкові групи (Table).

Попри назву, рідкоземельні елементи не є рідкісними у земній корі, однак їхні геохімічні властивості зумовлюють те, що вони рідко формують економічно придатні до видобутку рудні тіла [1], [2]. Завдяки особливим магнітним, оптичним та каталізаторним характеристикам REE широко застосовуються у високотехнологічному виробництві, енергетичних системах та оборонній промисловості.

Останніми роками питання забезпечення США рідкоземельними елементами неодноразово порушувалося у наукових і політичних дискусіях. Згідно з офіційними даними, Сполучені Штати є **на 100% залежними від імпорту** цих стратегічно важливих матеріалів, а ланцюг постачання REE визначається як фактор національної безпеки [3].

Переважна частина світових досліджень зосереджена на магматичних та метаморфічних родовищах – традиційних джерелах рідкоземельних елементів. Проте більшість таких родовищ, включно з тими, що раніше розроблялися у США, характеризуються нерівномірним вмістом, дефіцитом найбільш цінних елементів та економічною не вигідністю їхнього видобутку. Ситуація ускладнюється тим, що майже **100% світового виробництва найбільш критичних REE забезпечує Китай**, переважно з одного типу сировини – іон-адсорбційних глин, ресурс яких, на думку окремих фахівців, може бути вичерпаний у найближчі 10–20 років [4], [5], [6], [7].

У зв'язку із цим пошук альтернативних внутрішніх джерел REE та розробка ефективних методів їх вилучення набувають виняткового значення. Вугілля та вугільні відходи визначені як одна з перспективних альтернативних сировинних баз, що привертає особливу увагу дослідників Міністерства енергетики США (DOE). Згідно з окремими оцінками, під час сучасного видобутку вугілля у США може «ненавмисно» утворюватися до **44 000 тонн (40 000 метричних тонн) рідкоземельних елементів щорічно** [8].

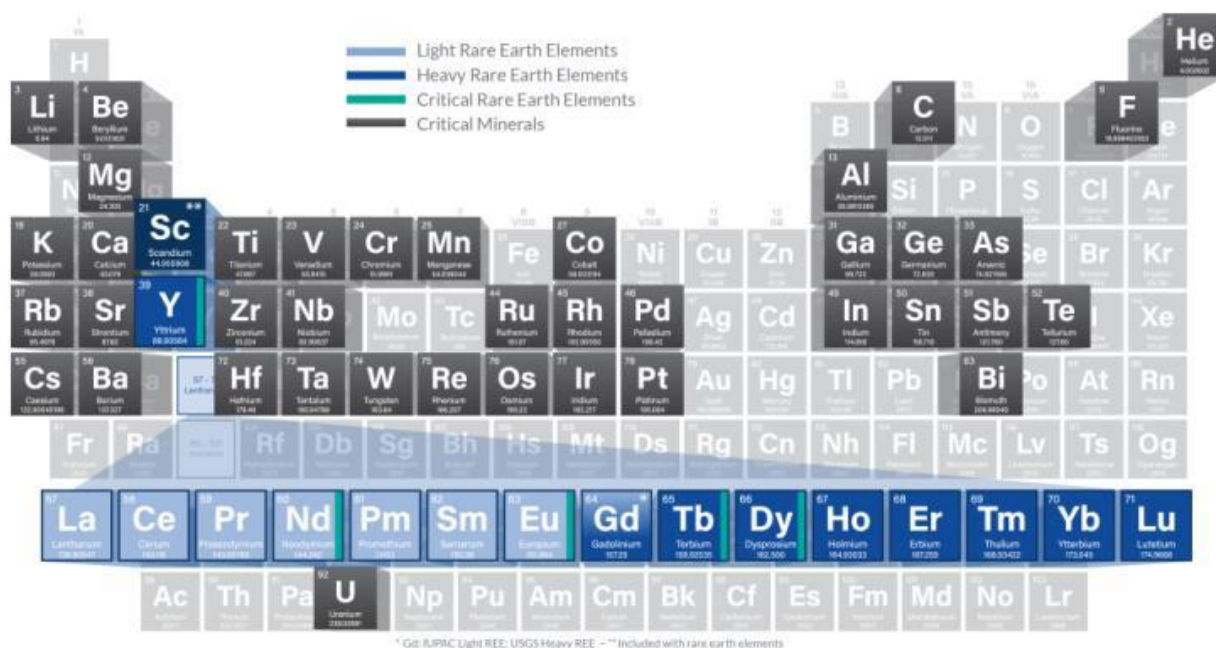


Рисунок 1. Періодична таблиця РЗЕ та інших критично важливих мінералів, визначених NETL [9].

Значний науковий внесок у вивчення лігнітних вугілля басейну Віллістон зробили Murphy et al. (2018) [10], Zygarlicke et al. (2019) [7] та інші дослідники. Їхні роботи доводять, що лігніт Північної Дакоти містить концентрації REE, які можуть бути економічно відновлюваними. Зразки вугілля, представлені у працях Kruger et al. (2017) [11], Murphy et al. (2018) [10] та Zygarlicke et al. (2019) [7], перевищують мінімальний поріг DOE у 300 ppm щодо потенційно економічно вигідної сировини (Figure 2). Це підтверджує високу перспективність лігніту басейну Віллістон як джерела критичних мінералів.

Більшість досліджень REE у вугіллі США зосереджувалася на методах вилучення елементів із вугілля та його побічних продуктів [12]. Головний акцент робився на встановленні концентрацій, достатніх для економічної доцільності технологічної переробки. Однак вивченню походження та просторової мінливості збагачення REE у вугільних пластах до останнього часу приділяли недостатньо уваги.

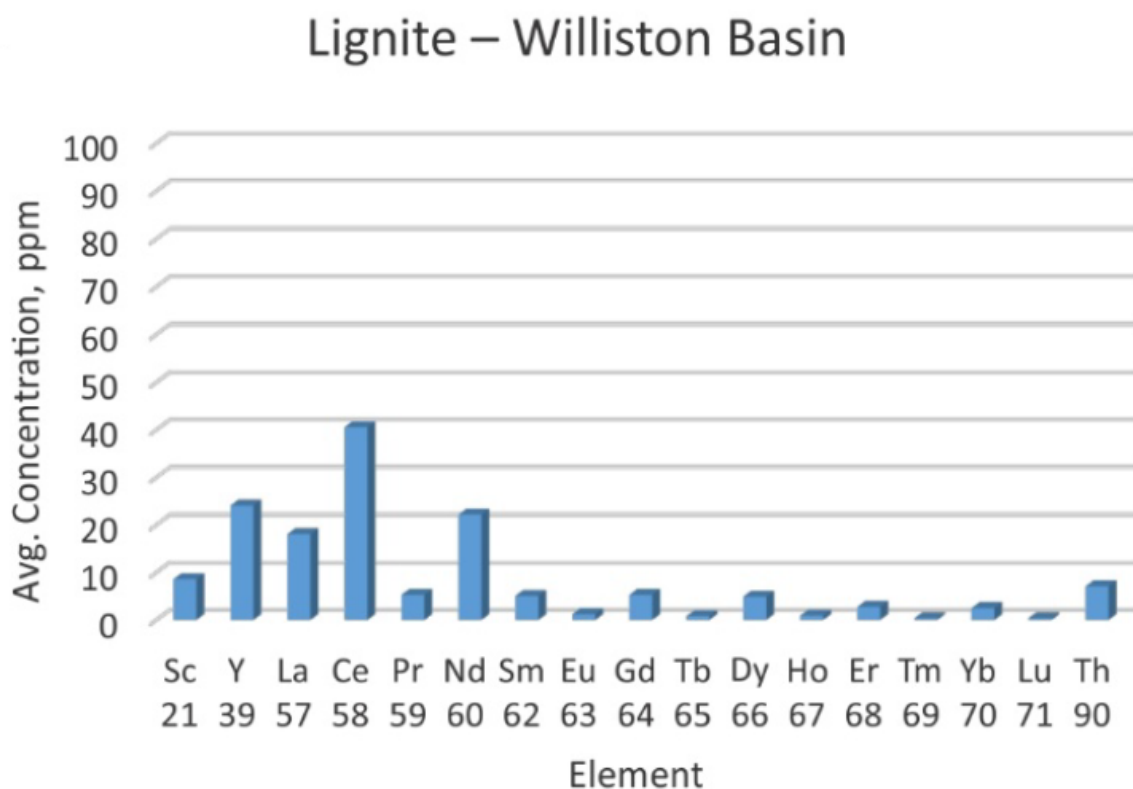


Рисунок 2. Середня концентрація ppm РЗЕ у зразках вугілля на основі сухої маси [7].

Обмеження попередніх досліджень полягає у тому, що вони фокусувалися переважно на зонах із найвищими концентраціями REE, не розкриваючи повної картини просторового розподілу у межах усього пласта. Наявні оцінки засновані лише на точкових даних і **не враховують вертикальної варіабельності** вмісту REE. Дослідження Laudal (2017) [14], Murphy et al. (2018) [10] та Kruger et al. (2017) [11] показали, що розподіл рідкоземельних елементів у вугіллі є нерівномірним: підвищені концентрації спостерігаються у верхній та нижній частинах пласта, тоді як центральні зони характеризуються нижчим вмістом.

Одним із ключових методологічних викликів залишається відсутність тривимірних геологічних моделей, здатних відобразити реальний розподіл REE у пластах. Створення таких моделей є необхідним для оцінки загальних

запасів рідкоземельних елементів у вугіллі та розробки оптимальних стратегій їх видобутку.

Запропонована у даній роботі методологія застосовує комплексні підходи тривимірного геологічного моделювання для побудови просторової моделі розподілу REE у лігнітному пласті. Такий підхід дозволяє відтворити закономірності збагачення рідкоземельними елементами та оцінити можливість їхнього економічного вилучення, а також є важливим кроком у плануванні майбутнього видобутку, включаючи можливість застосування методів in-situ recovery.

1.2 Регіональні умови

Район дослідження розташований на східному фланзі басейну Віллістон, у центральній-західній частині штату Північна Дакота. Ця територія також приурочена до східної окраїни формації Форт-Юніон, у межах якої зосереджена більшість лігнітових вугільних родовищ та діючих шахт штату (рис. 3). Стратиграфічні умови формації, що включають товсті товщі осадових порід палеоценового віку, сприяють формуванню потужних пластів лігніту та супутніх геохімічно активних середовищ, перспективних для накопичення рідкісноземельних елементів.

Східний фланг басейну характеризується поступовим зануренням пластів у бік його центральної частини, що впливає на зміну потужності, глибин залягання та літологічної неоднорідності вугільних горизонтів. Ці чинники визначають особливості просторового розподілу РЗЕ та потенціал їхнього збагачення. Крім того, регіон відзначається розвитком континентальних фацій накопичення, що позначається на мінливості властивостей лігніту та глинистих порід, які можуть відігравати роль у концентрації та фіксації рідкісноземельних елементів.

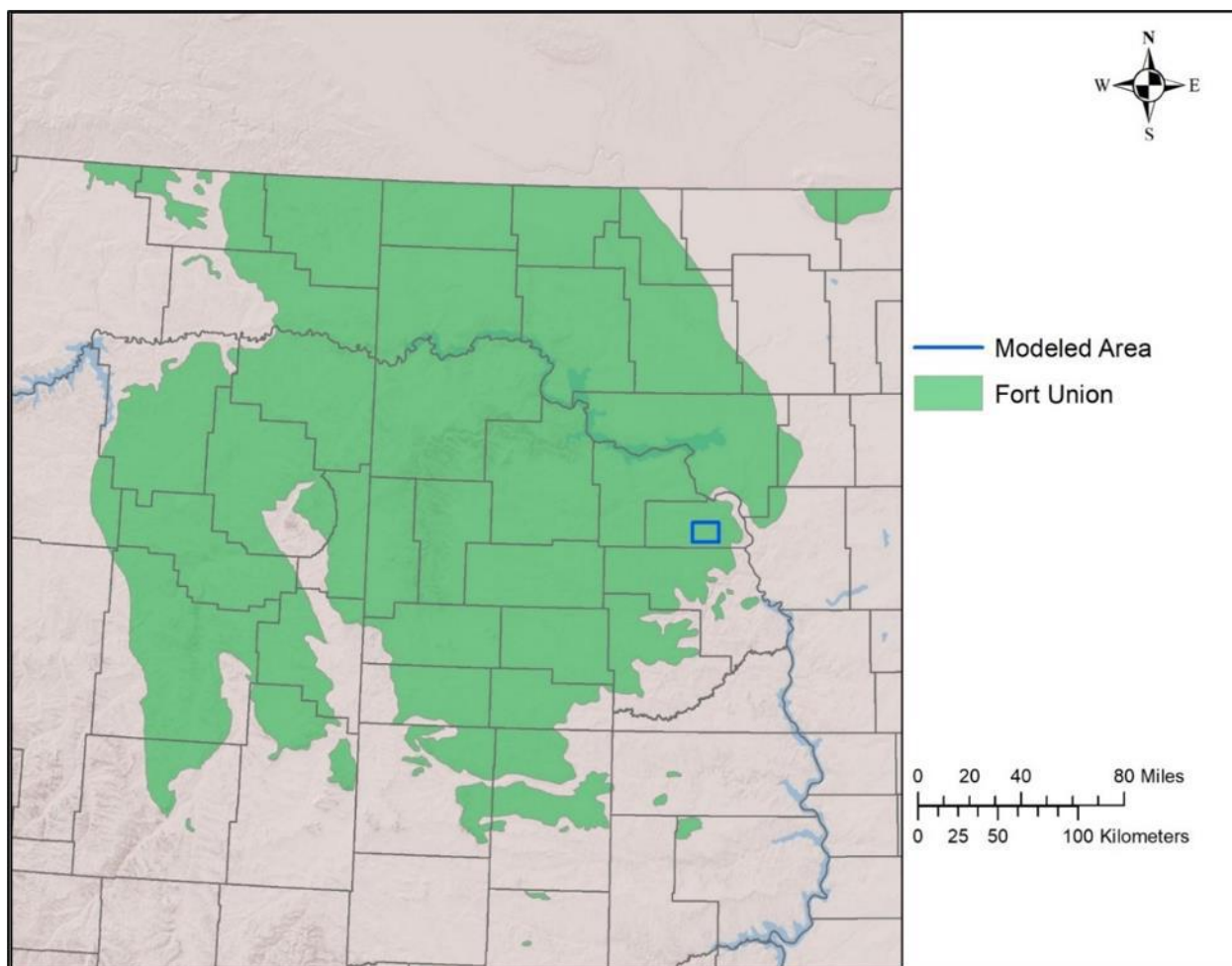


Рисунок 3. Регіональне середовище проведення дослідження.

Таким чином, вибір східного флангу басейну Віллістон як об'єкта дослідження обумовлений його геологічною перспективністю, наявністю значних ресурсів лігнітового вугілля та високою ймовірністю локалізації зон збагачення РЗЕ, що робить регіон оптимальною платформою для тривимірного моделювання та оцінювання потенціалу критичних мінеральних ресурсів.

1.3 Територія дослідження

Ділянка, обрана для моделювання та проведення детальних досліджень, розташована в окрузі Олівер, на південний схід від міста Центр, штат Північна Дакота (рис. 4). Територія охоплює район поблизу вугільної копальні BNI, яка

функціонує в межах формації Форт-Юніон і розробляє потужні пласти лігнітового вугілля.

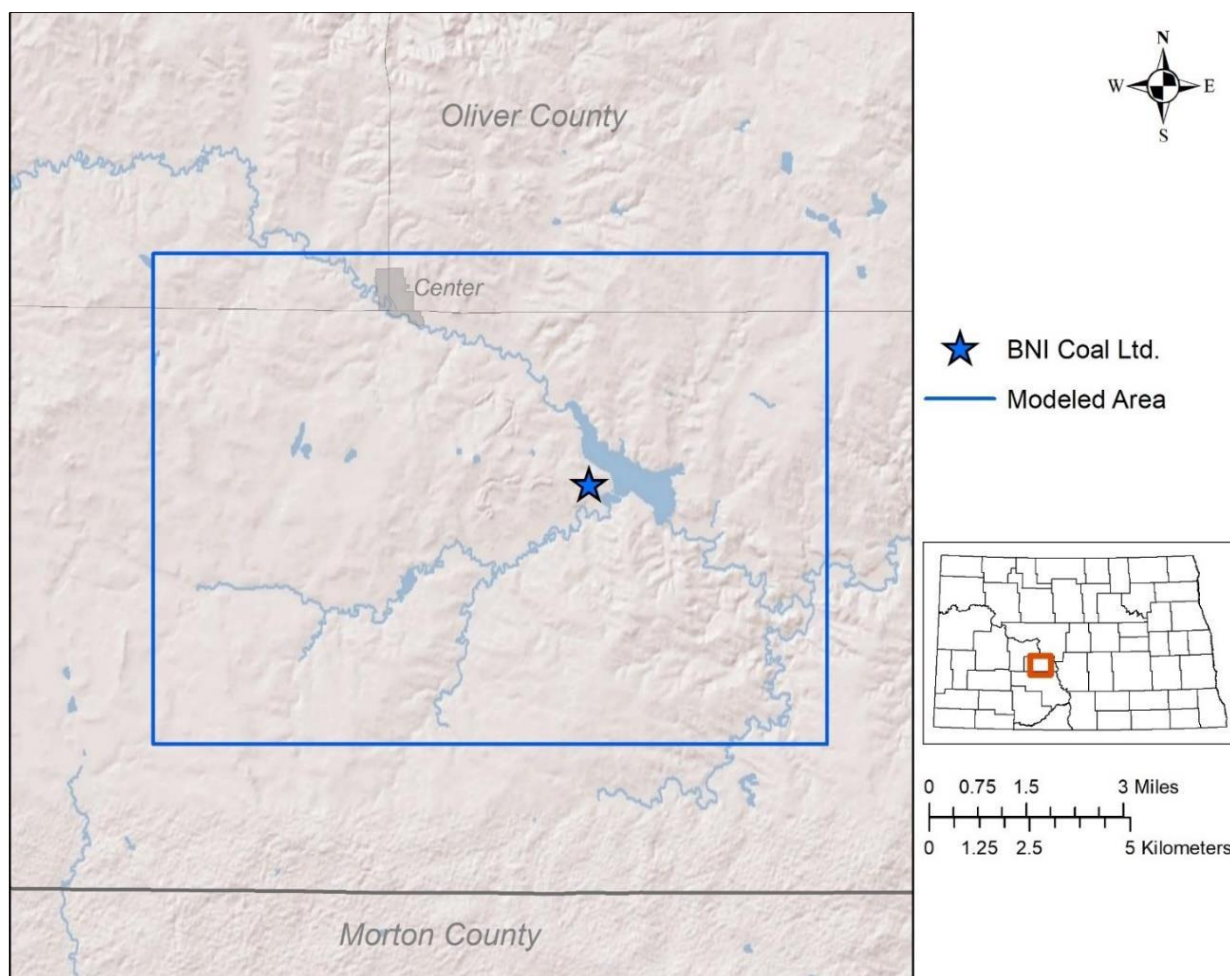


Рисунок 4. Зона дослідження навколо вугільної шахти BNI поблизу міста Центр, штат Північна Дакота.

Область дослідження характеризується добре розвиненою геологічною та геофізичною інфраструктурою, що включає бурові свердловини, дані геофізичних досліджень та значний обсяг геологічної документації, накопиченої в процесі тривалої історії вугільної розробки. Завдяки цьому район є придатною платформою для побудови тривимірних геологічних моделей та аналізу просторового розподілу рідкісноземельних елементів у межах конкретного вугільного пласта.

Крім того, вибір саме цієї ділянки обумовлений попередніми результатами досліджень, які засвідчили наявність концентрацій РЗЕ, що відповідають або перевищують мінімальний поріг економічно перспективних значень, визначений DOE (300 ppm). Це робить територію перспективною для подальших досліджень з оцінювання потенціалу лігнітового вугілля як альтернативного джерела критичних мінералів.

1.4 Методи

У межах даного дослідження застосовано комплексний підхід до побудови тривимірної геологічної моделі та моделі розподілу рідкісноземельних елементів (РЗЕ) у вугільному пласті. Основою для моделювання слугували аналітичні дані щодо концентрацій РЗЕ, отримані з пласта Nagel у межах вугільної копальні BNI. Ці дані були зібрані в рамках кількох попередніх робіт з геохімічної та мінералогічної характеристик і інтегровані у дане дослідження для подальшого просторового аналізу.

Для побудови структурної основи моделі використано літологічні колонки з даними про кровлі та підосви пластів, отримані з Національної системи даних про вугільні ресурси (National Coal Resource Data System, NCRDS). Додатковим джерелом інформації стали каротажні діаграми свердловин, розташованих у межах і навколо обраної ділянки дослідження. Ці матеріали дозволили визначити геометрію пласта, його простягання, мінливість потужності та характер вертикальної неоднорідності.

Особливу увагу приділено включенню до моделювання відомостей із наукової літератури щодо вертикального та латерального розподілу РЗЕ у лігнітовому вугіллі. На основі цих відомостей сформовано підхід до побудови моделі розподілу, що враховує закономірності збагачення верхніх та нижніх частин вугільного пласта.

Усі етапи геометричного та параметричного моделювання виконані з використанням програмного комплексу **Schlumberger Petrel**, який забезпечує інтеграцію геологічних, геофізичних та аналітичних даних, побудову 3D-

структурної моделі та подальший розподіл значень концентрацій РЗЕ у тривимірному просторі. Застосування цього програмного забезпечення дає змогу створити детальну та достовірну модель, придатну для подальшої оцінки ресурсного потенціалу та планування можливих варіантів видобутку.

1.5 Попередні дослідження

Лігнітове вугілля привертає значну увагу дослідників через підвищений потенціал збагачення рідкісноземельними елементами (РЗЕ), а також завдяки наявності вже відпрацьованих технологій вилучення рідкісноземельних металів із цього низькорозрабованого типу вугілля [15] (рис. 5). За оцінками, середній вміст загальних РЗЕ у вугіллі світу становить близько 68,5 ppm у перерахунку на цілісний вугільний матеріал [16], що відповідає приблизно 404 ppm у перерахунку на зольність. Для вугілля США середній вміст РЗЕ оцінюється на рівні 62,1 ppm [17], або 517 ppm на зольній основі.

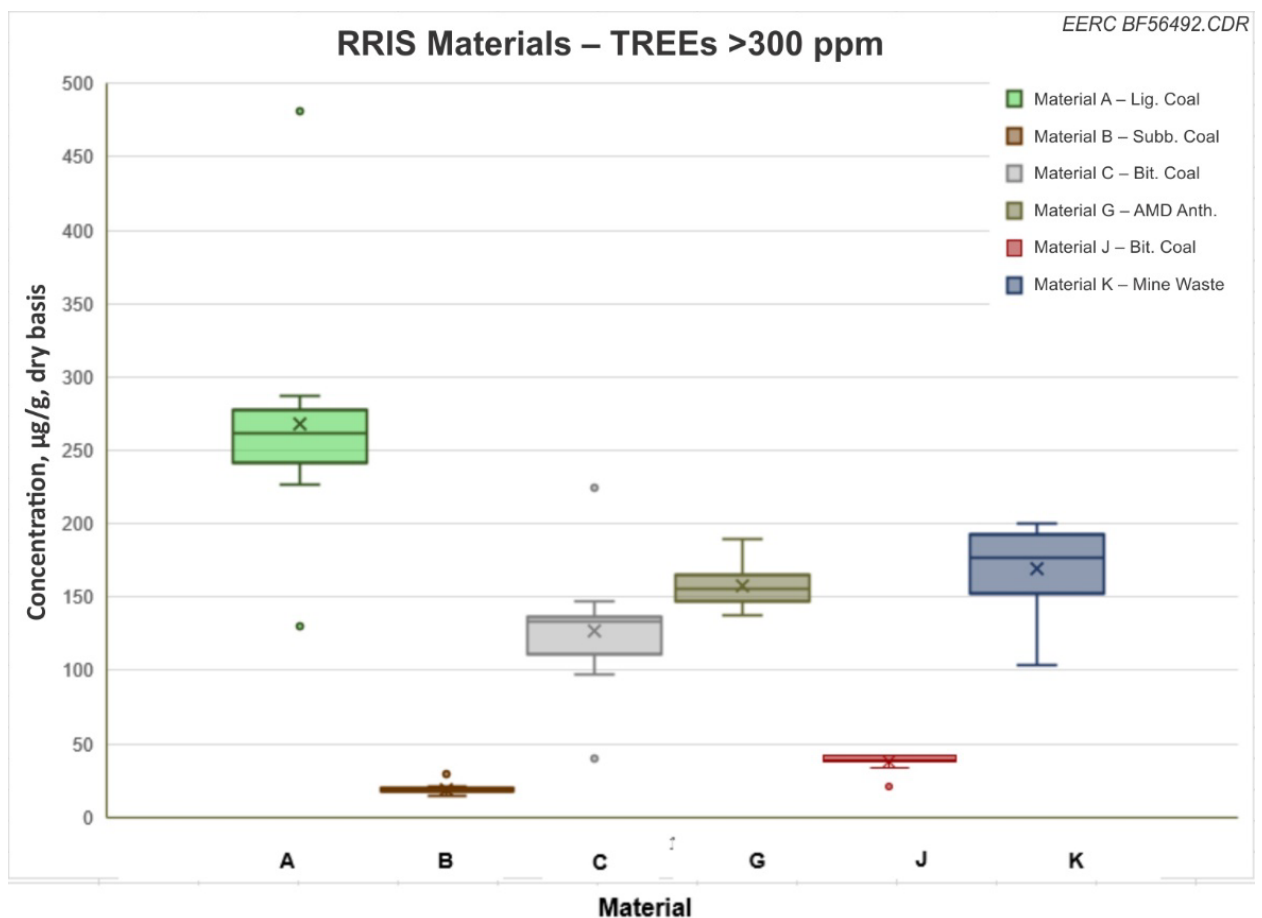


Рисунок 5. Розподіл даних TREE >300 ppm. [7]

Розподіл проб, що демонструють концентрації TREE понад 300 ppm, наведений на рисунку 5 [7]. Важливо підкреслити, що концентрації РЗЕ у “цілому вугіллі” (whole-coal) у середньому приблизно у 2,5 раза нижчі від відповідних значень у верхній континентальній корі [15]. Це свідчить про те, що геохімічні механізми збагачення РЗЕ у вугільних пластах є локальними та тісно пов’язаними з умовами осадо накопичення, діагенезу та мінералогічними особливостями вугленосних товщ.

У межах басейну Віллістон попередні роботи з вивчення РЗЕ у вугіллі демонструють, що збагачення рідкісноземельними елементами часто обмежується зонами поблизу контактів із покрівлею, підшвою або прошарками порід у розрізах вугільних пластів. Цю закономірність детально описано у дослідженні Kruger (2017) [11], де встановлено, що верхні та нижні частини пласта опиняються більш сприятливими для акумуляції критичних мінералів порівняно з центральною частиною. Вертикальна неоднорідність у розподілі РЗЕ є одним із ключових факторів, який необхідно враховувати під час оцінювання перспективності конкретного вугільного пласта та під час побудови тривимірних моделей розподілу елементів.

РОЗДІЛ 2.

ОГЛЯД РІДКІСНОЗЕМЕЛЬНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

2.1 РЗЕ у вугіллі

Seredin та Dai (2012) [15] визначили чотири основні генетичні механізми збагачення вугілля рідкісноземельними елементами (РЗЕ):

1. детритовий,
2. туфогенний,
3. інфільтраційно-вимивний,
4. гідротермальний.

Однак наукові спостереження за низькорозрашкованими та високоволатильними бітумінозними вугіллями вказують на наявність додаткової – **органічної** – форми зв'язування РЗЕ. Відомо, що важкі рідкісноземельні елементи (HREE) мають значно більшу спорідненість із органічними речовинами порівняно з легкими РЗЕ (LREE). Це пояснюється більшою стабільністю комплексів HREE–органіка, що зумовлює їх накопичення в торфах та низькорозрашкованих вугіллях [18]–[29].

Рідкісноземельні елементи, зв'язані з органічними лігандами в торфах і бурому вугіллі, можуть зберігатися у вугленосних товщах або переходити у вторинні фази. Зокрема, вони можуть:

- адсорбуватися на глинах [22], [23], [30];
- формувати карбонати (наприклад, бастнезит);
- входити до складу фосфатів (наприклад, ксенотим).

Мобілізація та вимивання LREE з прошарків, покрівлі чи підшви пласта сприяють підвищенню відношення LREE/HREE у прилеглий вугільній речовині [31], що пов'язано з включенням мобілізованих LREE у мінерали Sr і Ba [32]. За результатами попередніх досліджень встановлено, що співвідношення LREE/HREE у літотипі, що залягає безпосередньо нижче тонштейну, є вищим, ніж у базальних літотипах, збагачених HREE (3,67–5,30 у досліджених зразках).

Kruger et al. (2017) [11] зазначають, що в межах формації Sentinel Butte, до якої належить пласт Nagel, ймовірно спостерігалася підвищена вулканічна активність у зв'язку з тектонічними процесами, про що повідомляє і робота [33]. Це збільшує ймовірність наявності у вугільних товщах продуктів випадіння вулканічного попелу – тонштейнів, які відіграють ключову роль у формуванні зон локального збагачення РЗЕ [7].

2.2 Розподіл РЗЕ у вугіллі

Дослідження просторового розподілу рідкісноземельних елементів у вугіллі басейну Віллістон залишаються обмеженими та зосереджуються переважно на кількох повних вертикальних профілях і локальних вибірках в межах окремих пластів. Наявні результати не виявляють чіткої кореляції між концентраціями РЗЕ та змінами глибини залягання або положення пластів у розрізі. Водночас нестача системних вертикальних і латеральних профілів не дозволяє робити узагальнені висновки для всього басейну.

У роботах Murphy et al. (2018) [10] та Kruger et al. (2017) [11] встановлено, що найбільші концентрації РЗЕ, як правило, зосереджені на межах між вугільним пластом і вміщуючими породами – у зонах переходу до покрівлі, підшви та глинистих прошарків. Такий підхід до відбору проб сприяв тому, що дослідники переорієнтували зразкову базу саме на ці маргінальні зони, що призвело до недостатнього охоплення центральних частин пластів.

Дослідження Laudal (2017) [14], яке включало кілька вертикальних профілів пласта Nagel у кар'єрі Falkirk (округ Мерсер, Північна Дакота), підтвердило схильність концентрацій РЗЕ до маргінальних зон. Проте деякі профілі продемонстрували інший характер розподілу, що свідчить про просторову і генетичну неоднорідність механізмів збагачення в межах окремих ділянок пласта.

Таким чином, сучасний стан досліджень вказує на:

- **локальність** зон збагачення;
- **вертикальну неоднорідність**;

– **неповну картину латеральних змін у межах окремих пластів та басейну загалом.**

Це підкреслює необхідність застосування тривимірного геологічного моделювання для встановлення повноцінної просторової картини розподілу РЗЕ у вугіллі.

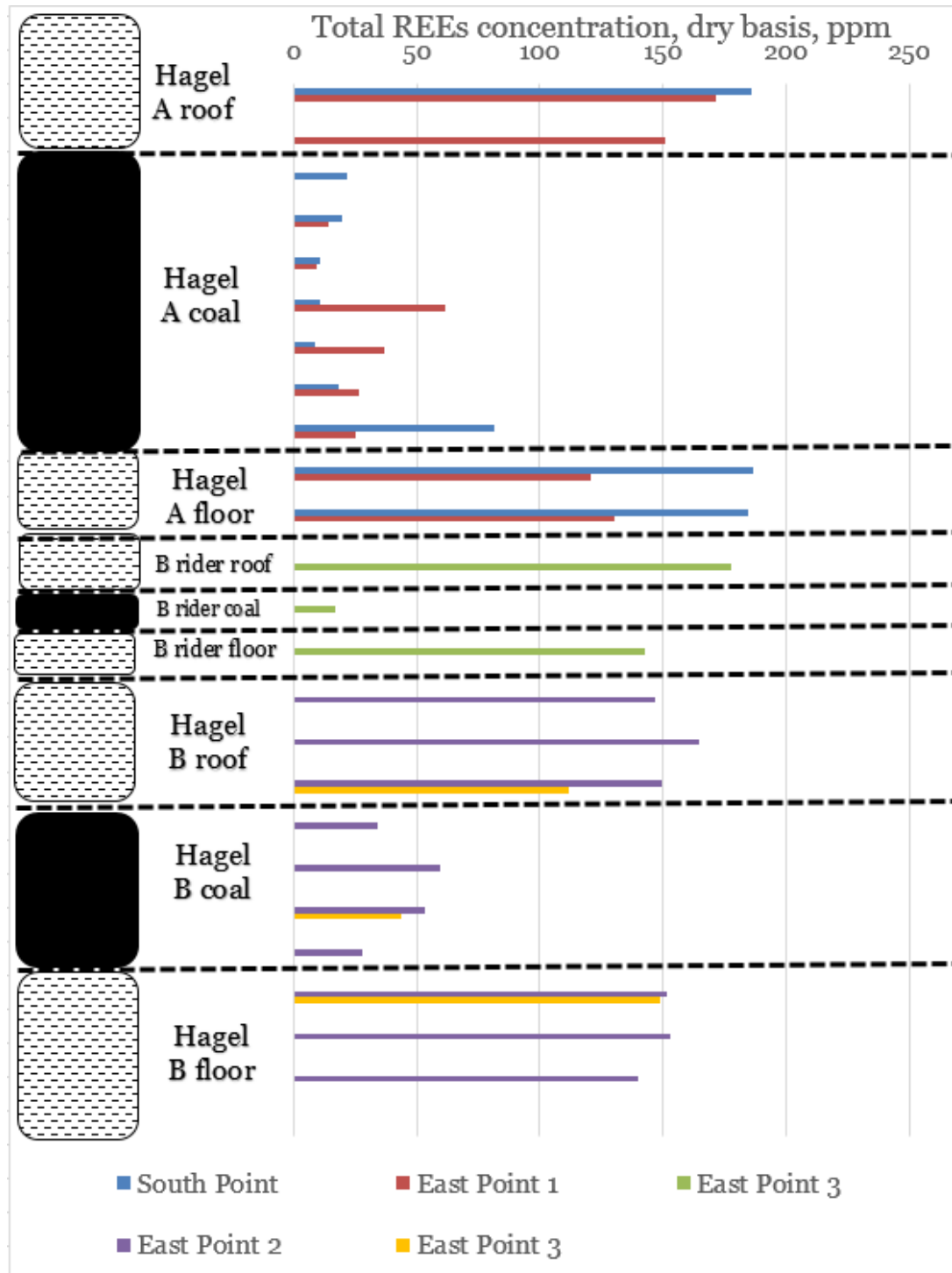


Рисунок 6. Загальний вміст РЗЕ з шахти Фолкерк, що показує розподіл по вертикалі через вугільний пласт. [14]

РОЗДІЛ 3.

ГЕОЛОГІЧНА ХАРАКТЕРИСТИКА РАЙОНУ ДОСЛІДЖЕННЯ

3.1 Fort Union

Група Fort Union є значним кластичним клином, який простягається від Порошкового басейну (Powder River Basin, PRB) до Віллістонського басейну і належить до палеоценового розрізу нижньої частини кайнозойської ери [11]. Формування цього кліноформного комплексу тісно пов’язане з тектонічними подіями Ларамійської орогенії, що відбувалася на заході та північному заході Північної Америки. Підняття, зумовлені орогенезом, спричинили міграцію алюмінієвих рівнин на схід, у напрямку Віллістонського басейну, де й акумулювалися осади верхньої крейди, палеоцену та частково еоцену [34].

До складу групи Fort Union входять п’ять формацій: **Ludlow**, **Cannonball**, **Slope**, **Bullion Creek** та **Sentinel Butte** (рис. 7). Ці товщі утворюють один із найбільш стратиграфічно повних і детально вивчених середовищ палеоценового віку на території Північної Дакоти.

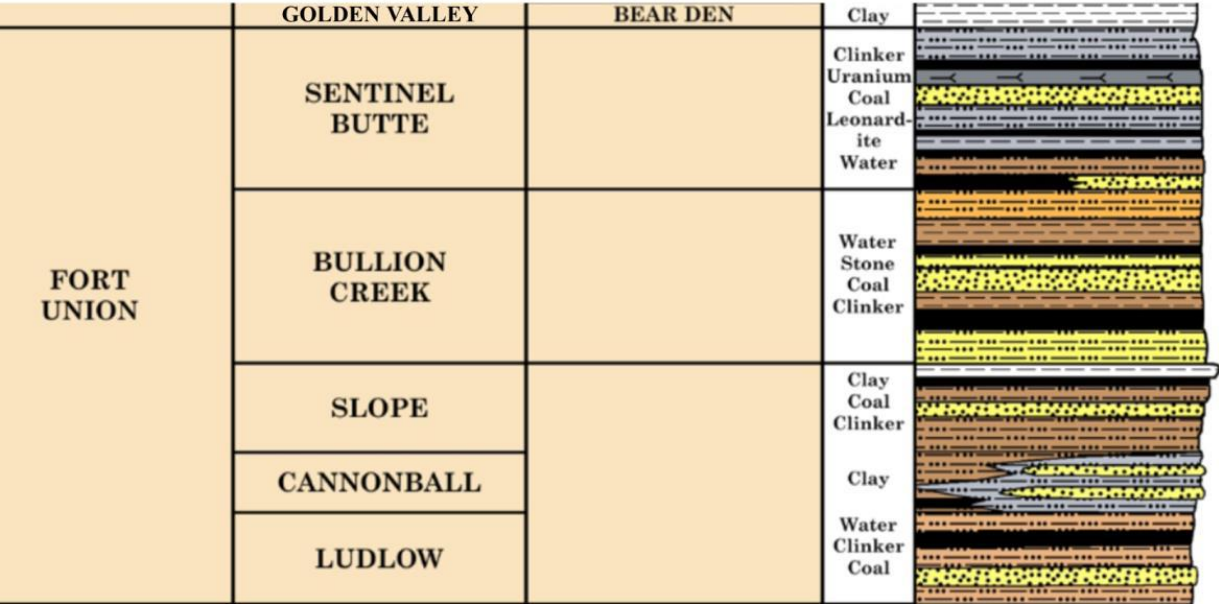


Рисунок 7. Стратиграфічна колонка, що показує формації групи Форт-Юніон. [35]

У межах Вайомінга та Монтани група Fort Union відома як **формація Fort Union**, а товща Tongue River є стратиграфічним еквівалентом формації Bullion Creek у Північній Дакоті. Вугленосні товщі групи були сформовані зі значних торфових масивів, які накопичувалися приблизно **55–65,5 млн років тому** у болотистих середовищах, що межували з розгалуженими алювіальними системами [11].

Осадкові умови та будова вугленосних горизонтів

Літологічні особливості пластів лігніту вказують на високу змінність розмірів та тривалості існування давніх торфовищ. Суттєва **латеральна неоднорідність** і присутність численних тонких, лінзоподібних і стратиграфічно невитривалих вугільних прошарків відображають короткотривалі пульсації гідрологічного режиму болотних систем (Kruger et al., 2017). Періодичні коливання рівня ґрунтових вод спричиняли припинення торфонакопичення та перехід до умов озерної седиментації, у результаті чого утворилися характерні глинисті прошарки. Саме ці **лакустринові глинисті товщі** часто формують верхні та нижні межі вугільних пластів [11].

Особливе значення має тектонічна та вулканічна активність, що супроводжувала пізній палеоцен. Під час формування **формації Sentinel Butte** вулканізм, пов'язаний з орогенними процесами, був достатньо інтенсивним, що підвищувало ймовірність випадіння шарів вулканічного попелу, які сьогодні зберігаються у вигляді **тонштейнів** [33], [11]. Наявність таких прошарків є ключовим чинником у вивченні механізмів збагачення вугілля рідкісноземельними елементами.

Літологічний склад групи Fort Union

Згідно з узагальненими даними [36], група Fort Union характеризується таким співвідношенням основних порід:

- **60–70 %**: глинисті та мулисті породи;
- **25–30 %**: пісковики та алевроліти;
- **приблизно 5 %**: лігніт.

Попри відносно невеликий відсоток вугілля в загальній товщі, його ресурси є надзвичайно значними. Лише в межах Північної Дакоти група містить приблизно **1,3 трильйона тонн лігніту**, з яких **25,1 млрд тонн (22,8 млрд метричних тонн)** можуть бути видобуті економічно доцільними методами сучасного відкритого видобутку [36], [37], [11].

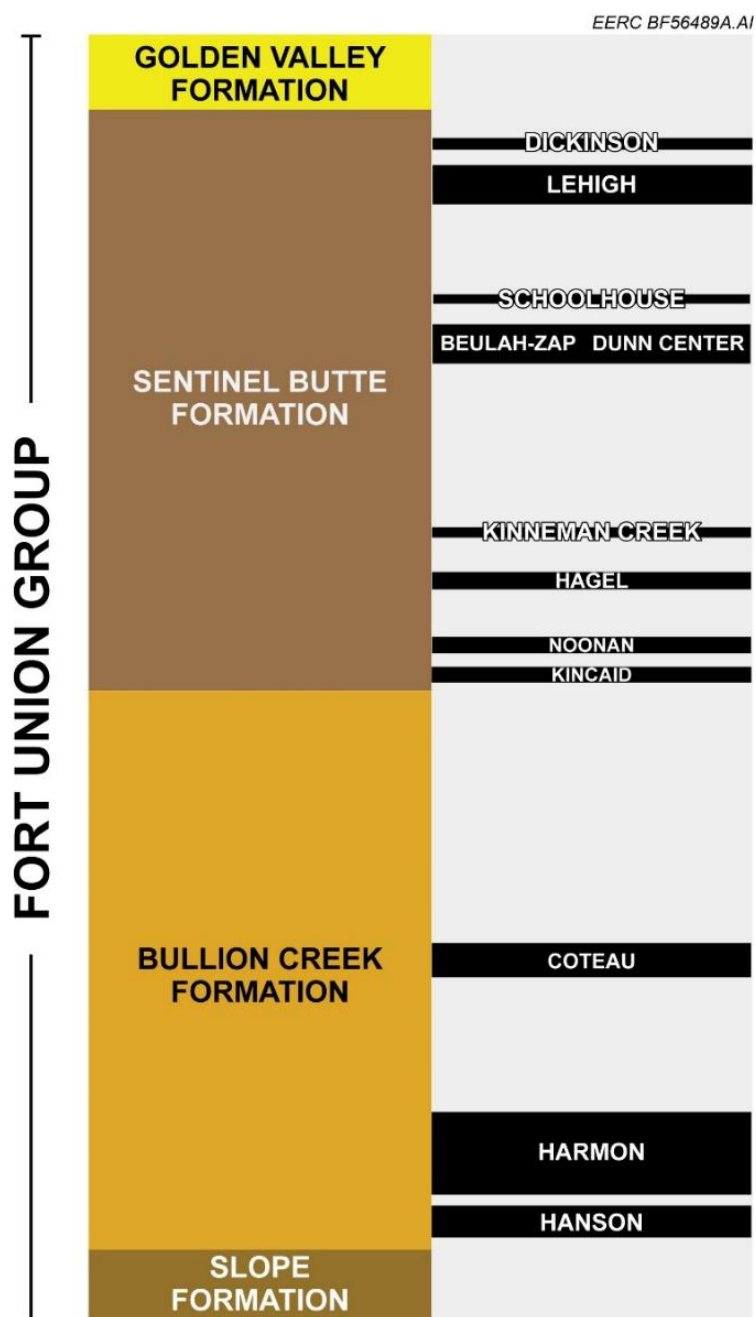


Рисунок 8. Вугільні пласти формацій Сентініел-Бютт та Булліон-Крік (річка Тонг), що показують буре вугілля у західній Північній Дакоті. [36]

Формація Sentinel Butte

Формація Sentinel Butte була сформована у флювіальних умовах палеоцену. Вздовж південних та західних окраїн Віллістонського басейну її товщина становить близько **330 футів (100 м)**, тоді як у центральній частині басейну досягає **приблизно 650 футів (200 м)** [34]. Ця формація є ключовою для вивчення лігнітових пластів, зокрема пласта **Hagel**, який є об'єктом розгляду в цій роботі.

3.2 Вугільний пласт Hagel

Вугільний пласт **Hagel** є основним та найважливішим об'єктом розробки в межах центральної частини Північної Дакоти. Саме цей пласт активно видобувається на шахті **Center Mine**, що експлуатується компанією *BNI Coal* у окрузі Олівер. Пласт Hagel є нижнім із головних лігнітових пластів, що входять до **формації Sentinel Butte** групи Fort Union, і має важливе промислове значення завдяки своїй потужності, умовам залягання та значним запасам.

Середня **потужність пласта** у межах ліцензійної ділянки шахти становить близько **7,8 фута** (приблизно 2,4 м), однак вона є неоднорідною у просторі. В окремих зонах товщина пласта перевищує **10 футів** (понад 3 м), що робить ці ділянки особливо привабливими для відкритого видобутку [7]. Така мінливість потужності характерна для лігнітових пластів формації Sentinel Butte, які формувалися у болотах зі швидко змінними умовами осадонакопичення.

Хоча наукових публікацій, присвячених детальному геологічному вивченню пласта Hagel у цьому районі, порівняно мало, попередні геологічні та ресурсні оцінки були проведені для визначення промислових запасів та придатності до розробки. Ізопахові карти та карти покривних товщ (рис 9, рис 10, рис 11) свідчать про:

- загальну конфігурацію та мінливість потужності пласта,

- розподіл товщі перекривних порід, що визначає можливість та економічність відкритого видобутку,

- межі вже відпрацьованих ділянок, а також ділянок, що залишаються перспективними для подальшої розробки.

Пласт характеризується відносно простими умовами залягання в межах східного борту Віллістонського басейну, однак локальні зміни рельєфу давніх палеоболотних систем та вплив тектонічних процесів призводять до нерівномірності його товщини. Це робить регіон важливим об'єктом для 3D-моделювання геологічної будови та прогнозування розподілу рідкісноземельних елементів (REE) у межах лігнітових покладів.

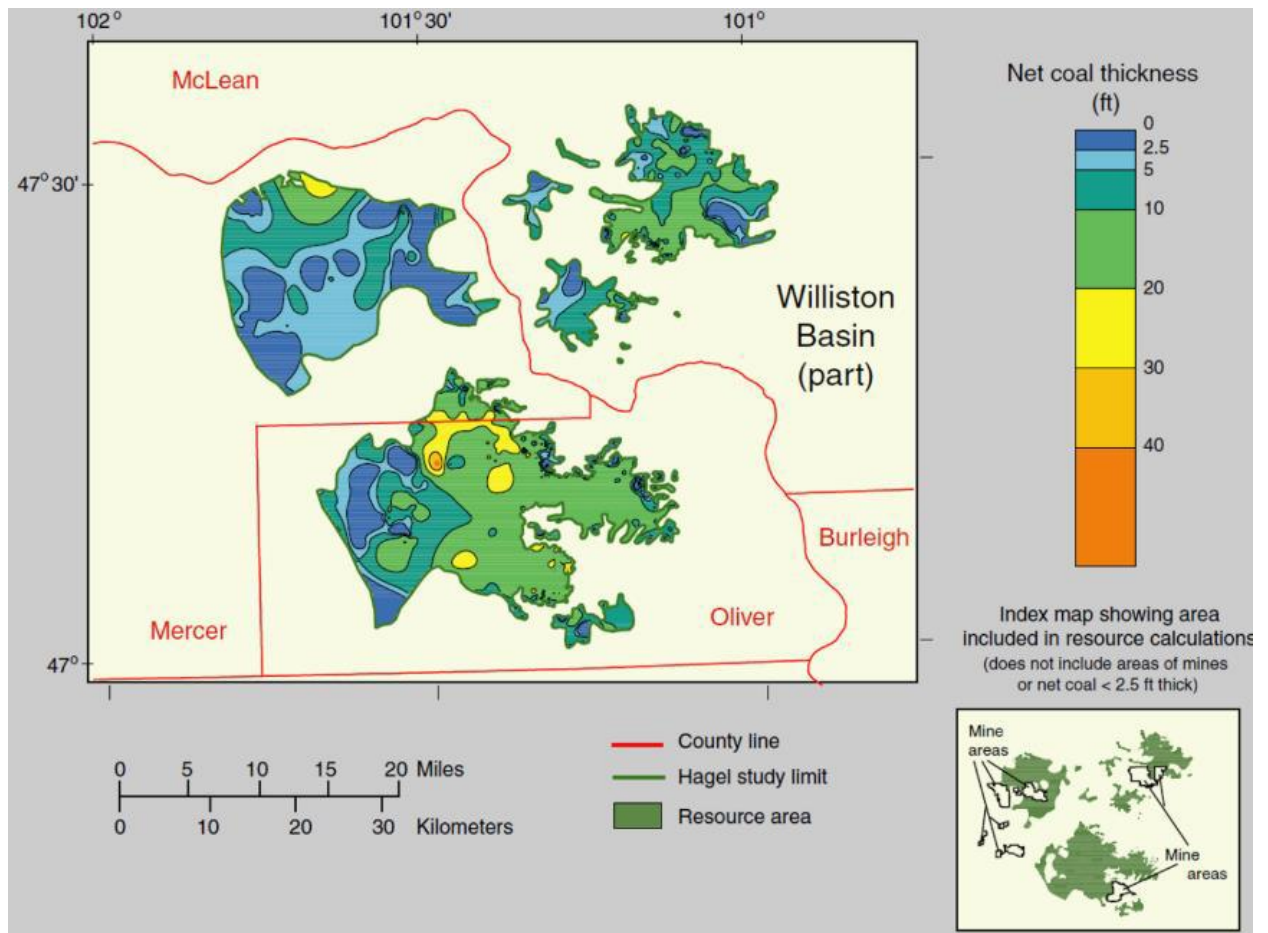


Рисунок 9. Карта ізопакіатних даних вугілля Хагеля. [38]

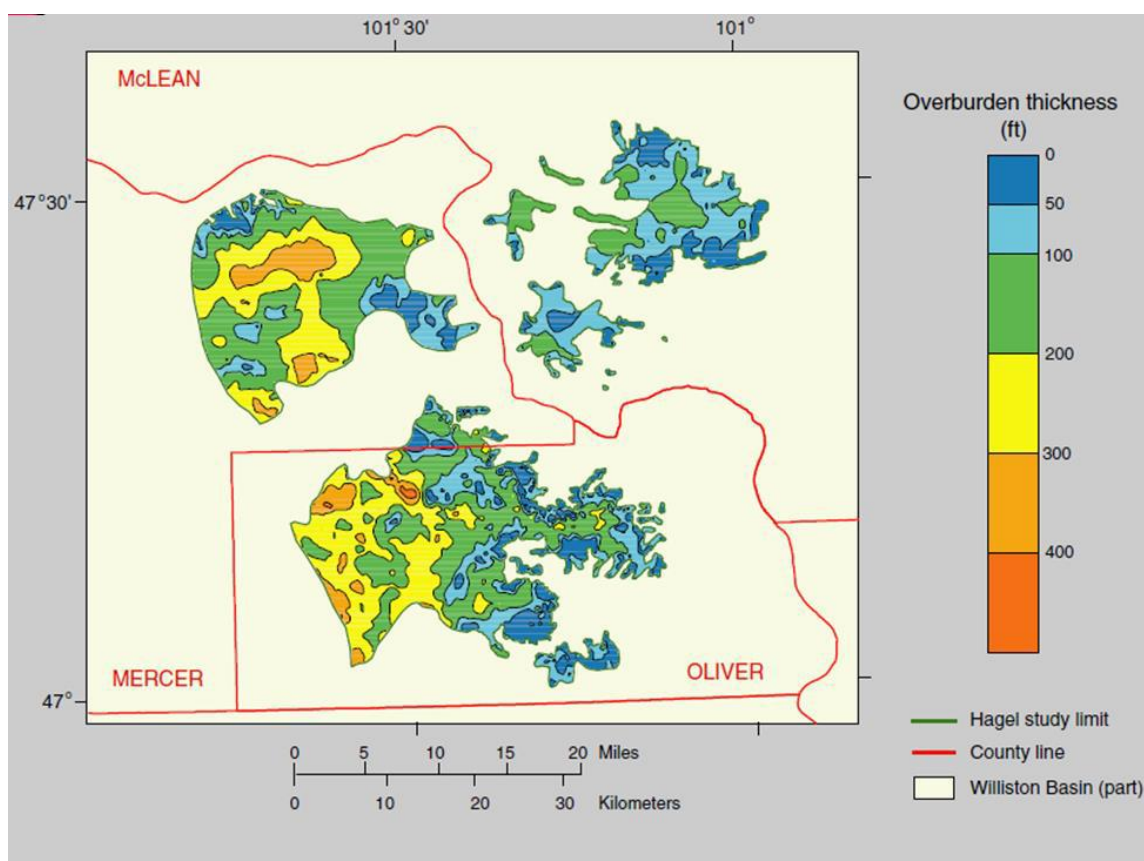


Рисунок 10. Карта ізопакітал розкривних порід Хагеля. [38]

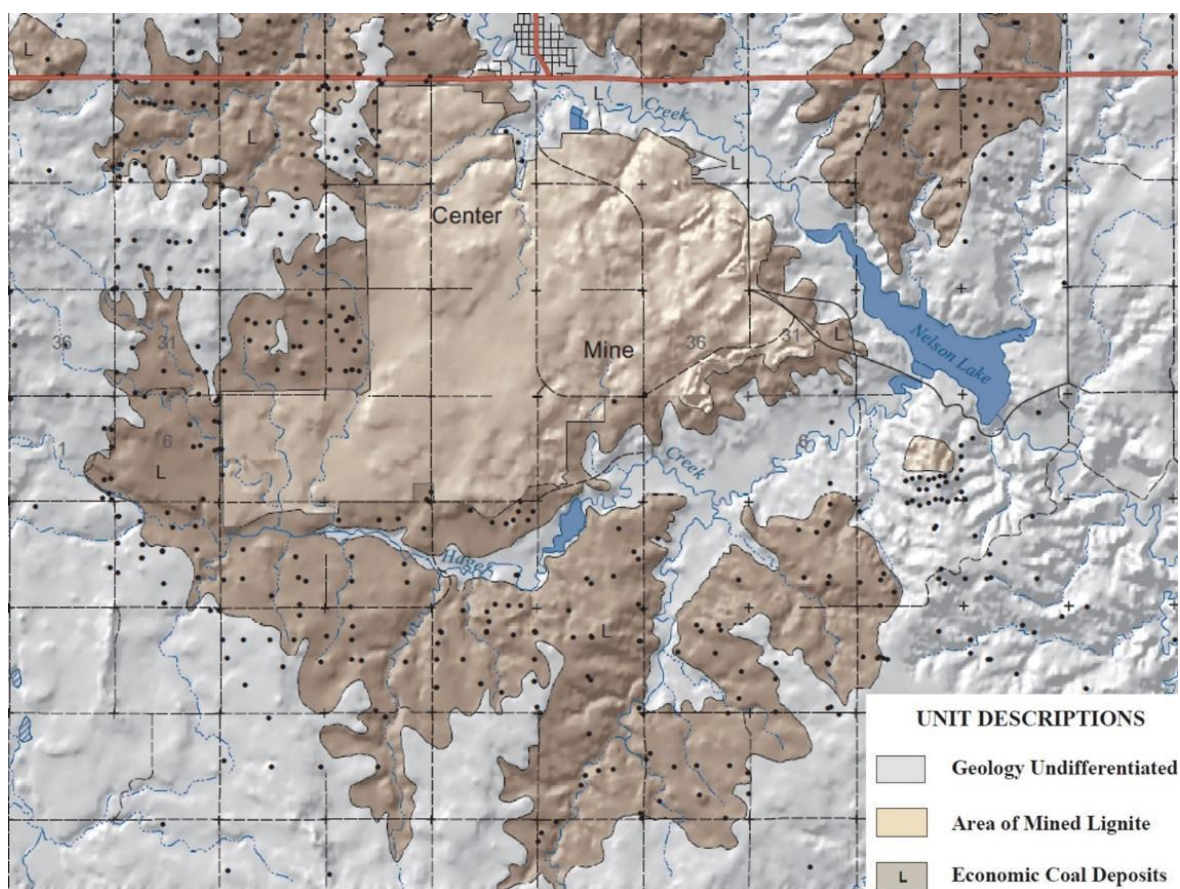


Рисунок 11. Площа запасів, що показує вугілля Хагеля з видобутими ділянками. [39]

РОЗДІЛ 4.

ДАНИ ТА ЇХ ХАРАКТЕРИСТИКИ

4.1 Попередні відбори та дослідження проб

У Північній Дакоті та сусідніх штатах, що входять до меж Віллістонського басейну, протягом останніх десятиліть було здійснено численні програми відбору проб лігнітового вугілля. У цих дослідженнях брали участь Північнодакотська геологічна служба (NDGS), Центр енергетичних і екологічних досліджень (EERC), а також інші державні та приватні організації. Завдяки їхній діяльності сформовано великий обсяг відкритих даних: сотні зразків вугілля були проаналізовані в рамках різних наукових і прикладних проєктів, що створило базу для подальших геохімічних та ресурсних досліджень.

Публікації NDGS містять значну кількість інформації про вміст рідкісноземельних елементів (REE) у вугіллі Північної Дакоти. Більшість досліджень зосереджена на західній частині штату, де розташовані глибші пласти формації **Bullion Creek**, зокрема H-Bed, Harmon і Hanson. Саме тут зафіксовано найвищі концентрації REE у лігнітових відкладах. Окрему увагу NDGS приділила також вивченню джерел збагачення рідкісноземельних елементів у відкладах формації **Golden Valley**, де виявлено підвищені вмісти як у вугіллі, так і в супутніх глинистих товщах [40].

Водночас дослідники з EERC здійснили масштабну програму відбору проб у межах Сполучених Штатів. Їх колекція включає сотні зразків із різних вугільних пластів, що охоплюють не лише Північну Дакоту, але й інші ділянки Віллістонського басейну. Особлива увага була приділена активним гірничим районам у центрально-західній частині Північної Дакоти – саме тому багатьох проб, використаних у цьому дослідженні, походять із цих територій. Значний внесок цієї установи полягає також у створенні репрезентативної бази даних, яка охоплює геохімічні параметри вугілля з різних геологічних середовищ та стратиграфічних рівнів [7].

Загалом попередні зусилля з відбору проб забезпечили ґрунтовну основу для подальшої інтерпретації розподілу REE та моделювання їхнього просторового варіювання. Проте, незважаючи на велику кількість зібраних даних, для більшості пластів все ще бракує детальної 3D-характеризації та повноцінних вертикальних профілів, що підкреслює актуальність даного дослідження.

4.2 Дані геофізичних та описових свердловинних матеріалів

Важливим джерелом інформації для побудови структурної моделі пласта Nagel стали дані Національної системи ресурсів вугілля (NCRDS), доступні через онлайн-платформу **USTRAT** [41]. У цій базі міститься значна кількість свердловин із бурових журналів, що включають:

- описові літологічні колонки, складені буровими майстрами,
- дані про положення покрівлі та підосви вугільних пластів,
- інтерпретовані стратиграфічні горизонти для різних геологічних утворень.

Завдяки цим матеріалам стало можливим простежити просторове положення пласта Nagel на великій території та отримати перші уявлення щодо його структурних особливостей. Значна частина цих даних пройшла стандартизацію та нормалізацію в рамках робіт Браяна Шефера (USGS), який уніфікував **номенклатуру літологічних типів та позначення вугільних горизонтів** у межах всієї бази NCRDS [42]. Така уніфікація була критично важливою для можливості інтегрувати записи, отримані різними установами та в різні роки, у єдину структурну модель.

Крім описових журналів, до моделювання були долучені й **каротажні діаграми свердловин** (wireline logs), доступні для території дослідження. Найбільш інформативними виявилися:

- гамма-каротаж,
- електричний каротаж,
- індукційний каротаж,

- щільнісний та нейтронний каротаж (де доступні).

Ці методи дозволили точніше окреслити межі вугільного пласта, особливо у зонах, де бурові журнали містили неповні або узагальнені описи. На основі каротажних кривих були виконані **інтерпретації глибин покрівлі та підшви пласта (tops and bottoms picks)**, що увійшли до процесу побудови структурної поверхні Nagel в програмному середовищі Petrel.

Поєднання описових та геофізичних свердловинних даних створило можливість сформувавши більш детальну та достовірну модель структурної геометрії пласта, виявити його локальні зміни потужності, а також підвищити точність подальшого 3D-моделювання розподілу рідкісноземельних елементів у межах лігнітових відкладів.

РОЗДІЛ 5. 3D МОДЕЛЮВАННЯ

5.1 Вихідні дані

Для побудови тривимірної геоцелюлярної моделі було використано дані з різних джерел, описаних у попередніх розділах. Основою моделювання стали **дані по покрівлях пласта (well tops)**, зібрані з двох ключових джерел: бази NCRDS та каротажних діаграм (wireline logs), отриманих із території діяльності вугільних шахт (Рисунок 12). Ці відмітки покрівель були використані для формування структурних поверхонь, що визначають геометрію пласта Hagel у межах моделі.

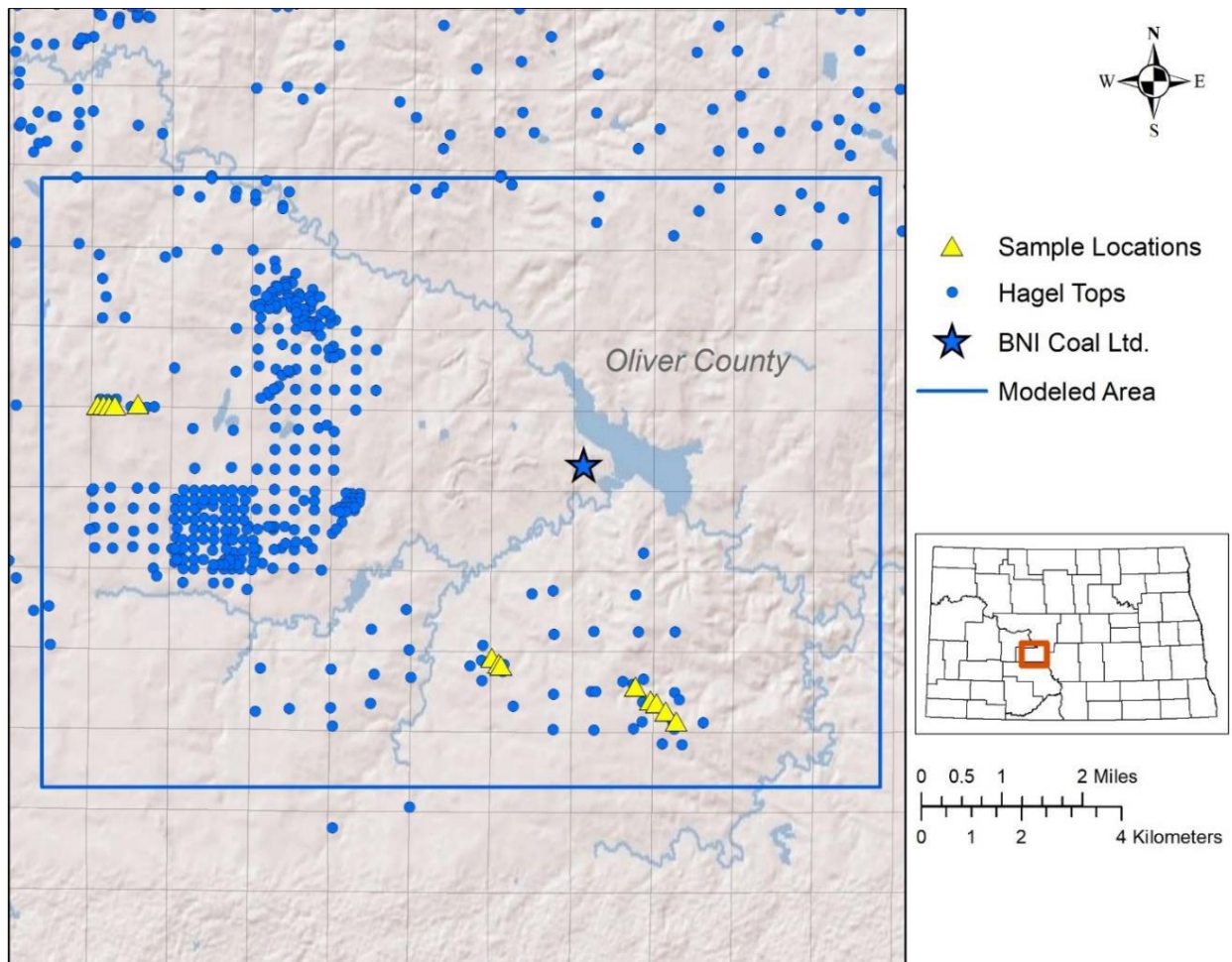


Рисунок 12. Розташування верхівок, що використовуються для визначення структури вугільного пласта Хагеля та місць відбору зразків РЗЕ.

Усі свердловинні відмітки було імпортовано в середовище моделювання **Petrel**, де вони пройшли детальну валідацію. На етапі створення структурної поверхні кожна точка покрівлі перевірялася на наявність аномальних структурних високів або знижень, які могли свідчити про помилки у первинних даних. Якщо такі невідповідності було виявлено, відмітки коригувалися відповідно до загальних тенденцій будови пласта. У випадках, коли значення не піддавалися виправленню або суперечили регіональній геометрії, такі точки виключалися з моделі, щоб уникнути спотворення кінцевої структурної поверхні.

Окрім структурних даних, у моделювання було включено **точкові аналітичні дані щодо вмісту рідкісноземельних елементів (REE)**. Ці проби були отримані безпосередньо під час відкритих гірничих робіт на пласті Nagel. Хоча проби мали просторові координати (широту та довготу), вони **не містили інформації про абсолютну висоту або глибину відбору**, оскільки збиралися у відкритих виробках.

Для коректного прив'язування проб до моделі застосовувалася така методика:

1. **Положення покрівлі пласта**, отримане зі структурної поверхні, використовувалося як вихідна висотна відмітка для всіх проб, відібраних із верхньої частини пласта.
2. У випадках, коли на одній і тій самій ділянці були відібрані декілька проб із різних стратиграфічних рівнів, їхнє положення уточнювалося згідно з описами глибин або інтервалів відбору з польових журналів.
3. Після просторової прив'язки всі REE-проби були інтегровані в модель як точкові значення відповідної властивості, що дозволило застосовувати геостатистичні методи інтерполяції в межах 3D решітки.

У підсумку, об'єднання нормалізованих структурних даних та просторово прив'язаних хімічних аналізів створило комплексну основу для побудови геоцелюлярної моделі, яка відображає як геометрію пласта Nagel, так і просторові закономірності розподілу рідкісноземельних елементів.

5.2 Структурне моделювання

Структурне моделювання пласта Nagel було зосереджене виключно на основному пласті, який відпрацьовується в межах досліджуваної території. На північ від району робіт цей пласт стратиграфічно відповідає тому, що в літературі позначається як Upper Nagel. Для побудови моделі були використані відмітки покрівлі та підосви пласта, визначені за результатами інтерпретації геофізичних каротажів існуючих свердловин, а також за даними бурових журналів та нормалізованими відмітками з бази NCRDS.

На рисунку 13 представлено типовий приклад вхідної інформації по свердловинах:

- точкові дані за концентраціями рідкісноземельних елементів (TREE);
- літологічний розріз зі свердловинних журналів NCRDS, що показує потужність пласта Nagel та літологію покрівлі й підосвини;
- дані каротажу шахтних свердловин (гамма-каротаж, густинний каротаж та шунтова електропровідність).

Усі відмітки покрівлі та підосви були перевірені на узгодженість і точність. Після цього їх конвертовано у точкові набори даних, які стали основою для побудови структурних поверхонь.

Інтерполяція структурних поверхонь

Для побудови поверхонь покрівлі та підосви використовувався алгоритм збіжної (convergent) інтерполяції в програмному середовищі Petrel. Результати інтерполяції наведені на рисунках 14 та 15, де показано глибину залягання та товщину пласта Nagel відповідно.

Структурні поверхні відображають такі загальні закономірності:

- пласт *поступово витоншується* у східному напрямку;
- спостерігається *підняття до сходу–північного сходу* та *заглиблення до заходу*;
- у місцях, де поверхня пласта перетинається з сучасним рельєфом, відбувається *виклинювання* та повне зникнення пласта внаслідок ерозії.

На рисунку 16 подано карту потужності покривних відкладів (overburden), яка дає змогу простежити топографічні та стратиграфічні зміни навколо зон виклинювання пласта.

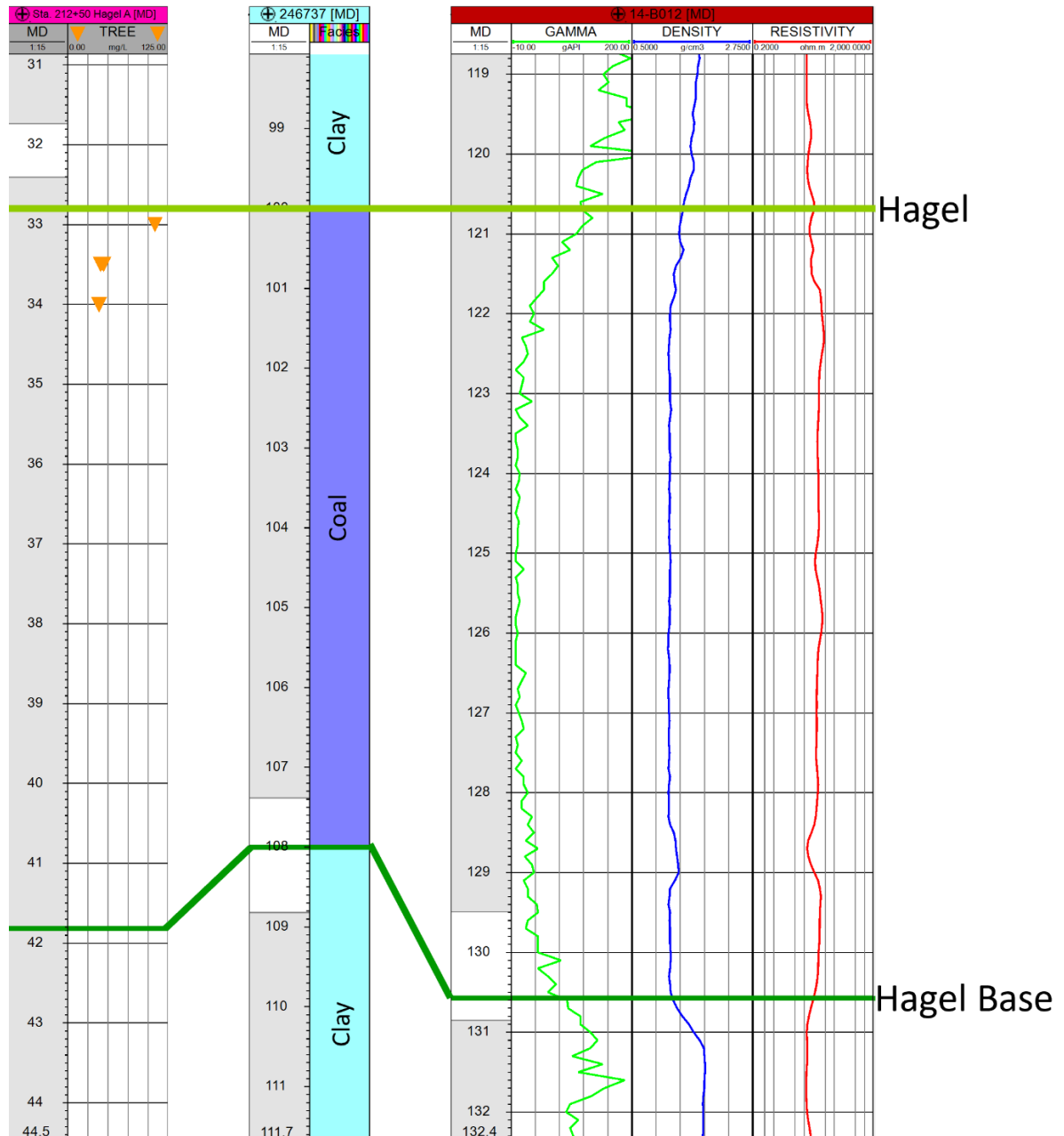


Рисунок 13. Приклад вхідних даних каротажу для 3D-геоцелюлярної моделі. Ліворуч: вибірка даних у вигляді точкових даних, що показують ДЕРЕВО, Посередині: Літологічний каротаж з бази даних NCRDS, що показує вугілля Hagel та літологію вище та нижче залягаючого вугільного пласта. Праворуч: каротаж на каротажі з шахти (зліва направо) 1) гамма-випромінювання; 2) густина; 3) питомий опір неглибокого залягання.

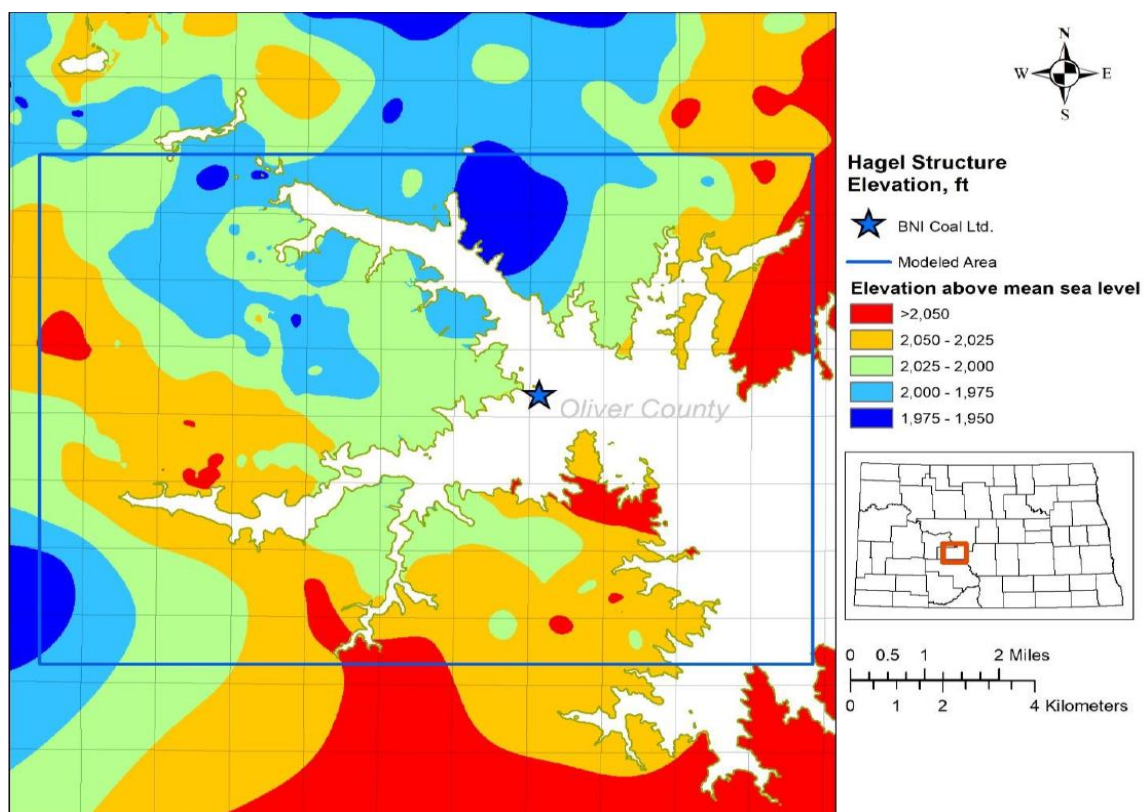


Рисунок 14. Структурна контурна карта вугільного пласта Хагель у досліджуваній зоні.

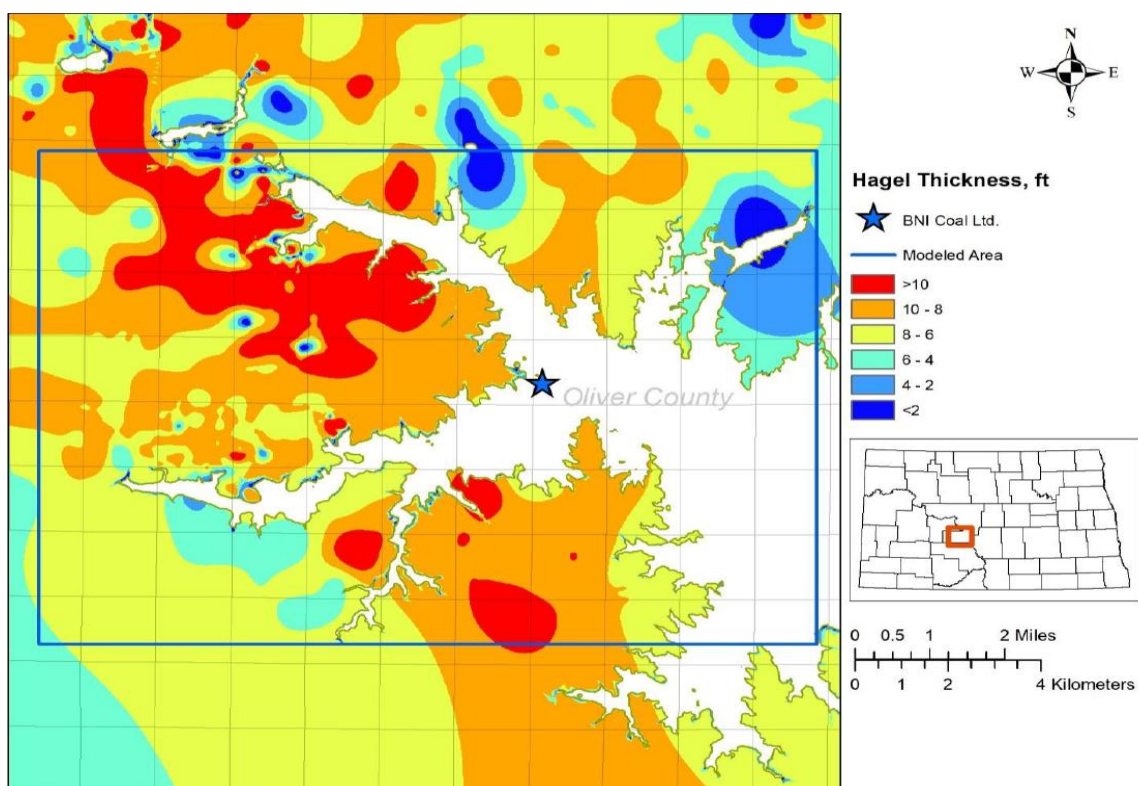


Рисунок 15. Карта товщини вугільного пласта Хагеля.

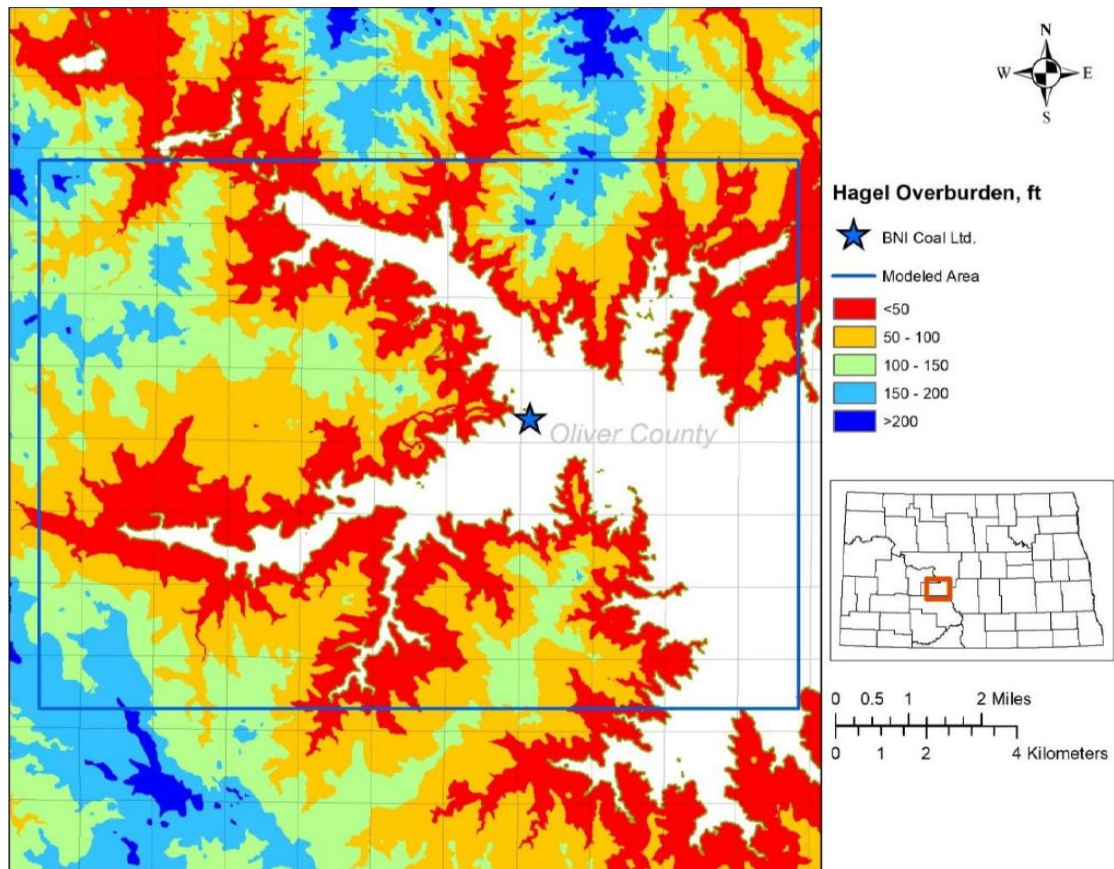


Рисунок 16 Карта розкривних порід пласта Хагеля

Перевірка, коригування та поєднання із сучасною поверхнею

Після створення структурних поверхонь було проведено їхню повторну перевірку на наявність аномальних "високих" та "низьких" ділянок, пов'язаних із помилковими відмітками свердловин. Для уточнення геометрії структурні поверхні поєднували з цифровою моделлю рельєфу (DEM). DEM було перетворено у формат точкового shapefile та імпортовано в Petrel, де її інтерпольовано з використанням тієї ж коміркової сітки, що й для пласта Hagel.

У місцях, де покрівля або підшва моделі перетинала сучасну поверхню землі, їм присвоювалося значення поверхні. Це дозволило точно визначити зони повного ерозійного зрізу пласта та коректно відобразити їх у моделі.

Використання однакової вертикальної координати для структурних поверхонь та поверхні рельєфу забезпечило можливість автоматичного формування зон виклинювання (pinch-outs) у фінальній геометрії моделі.

Характеристики моделі

Основні структурні параметри пласта Nagel, визначені за результатами моделювання, наведені в таблиці 1:

Параметр	Значення
Середня потужність, фут	5.8
Максимальна потужність, фут	15.6
Мінімальна потужність, фут	0
Середня глибина, фут	52.7
Максимальна глибина, фут	217.5

Побудова 3D-сітки

Для побудови геологічної моделі було використано структурні поверхні, скориговані з урахуванням DEM. Розмір комірок у плані становив 100×100 футів, інтерполяція здійснювалась алгоритмом averaging.

Наступним кроком було визначення вертикальної дискретизації. З огляду на те, що відбір проб здійснювався кожні 6 дюймів (~0,5 фута), було необхідно забезпечити достатню вертикальну деталізацію. Середня потужність пласта в районі відбору проб становила ~10 футів, тому для отримання комірок товщиною ~6 дюймів модель розбили на приблизно 20 вертикальних шарів. Такий підхід дозволив адекватно врахувати вертикальний розподіл рідкісноземельних елементів при подальшому моделюванні властивостей.

Рисунок 17 демонструє готову тривимірну структурну модель пласта Nagel.

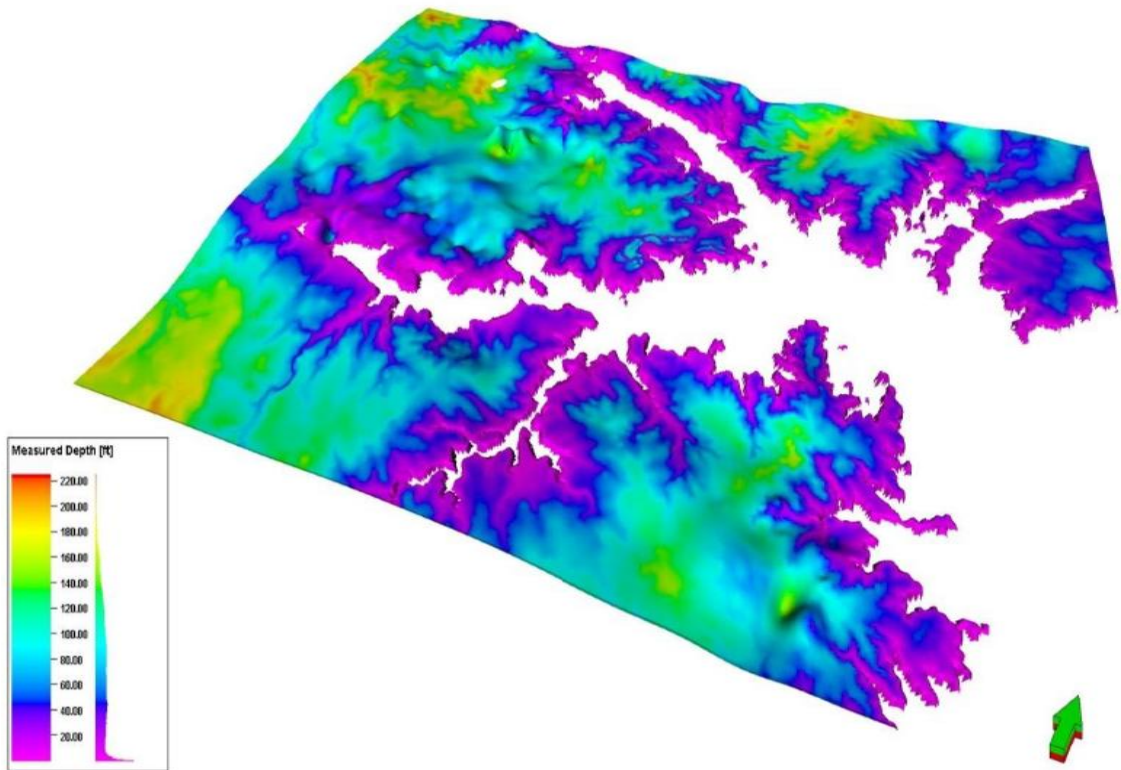


Рисунок 17. 3D-модель структури шва Хагеля з виміряною глибиною.

5.3 Моделювання властивостей

Метою моделювання властивостей у межах моделі Hagel є відтворення просторового розподілу загального вмісту рідкісноземельних елементів (Total Rare Earth Elements, TREEs) у вугленосному пласті. Оскільки TREE характеризуються виражено неоднорідним вертикальним профілем, особлива увага приділялась моделюванню саме вертикальної мінливості концентрацій. Попередні дослідження Laudal (2017) [14] та Murphy (2018) [10] детально показують, що TREE у лігнітових пластах формують характерну **U-подібну або С-подібну криву розподілу**: найвищі концентрації спостерігаються у верхній та нижній частинах пласта, тоді як центральна частина характеризується значно нижчими значеннями.

Laudal (2017) [14] для пласта Hagel зафіксував наступну закономірність:

- верхній фут: **21.8 ppm**,
- мінімальні значення у центрі пласта: **8.3 ppm**,
- нижній фут: **81.1 ppm**.

Профіль, наведений у Laudal (2017), показує чітку залежність TREE від вертикального положення у пласті, що узгоджується з моделями Murphy (2018) [10]. Через брак достатньої кількості вертикально орієнтованих точкових даних у межах площі моделювання розподіл TREE був реалізований переважно на основі **методу тренд-моделювання** з використанням наведеного у Laudal (2017) вертикального профілю (Рис. 18).

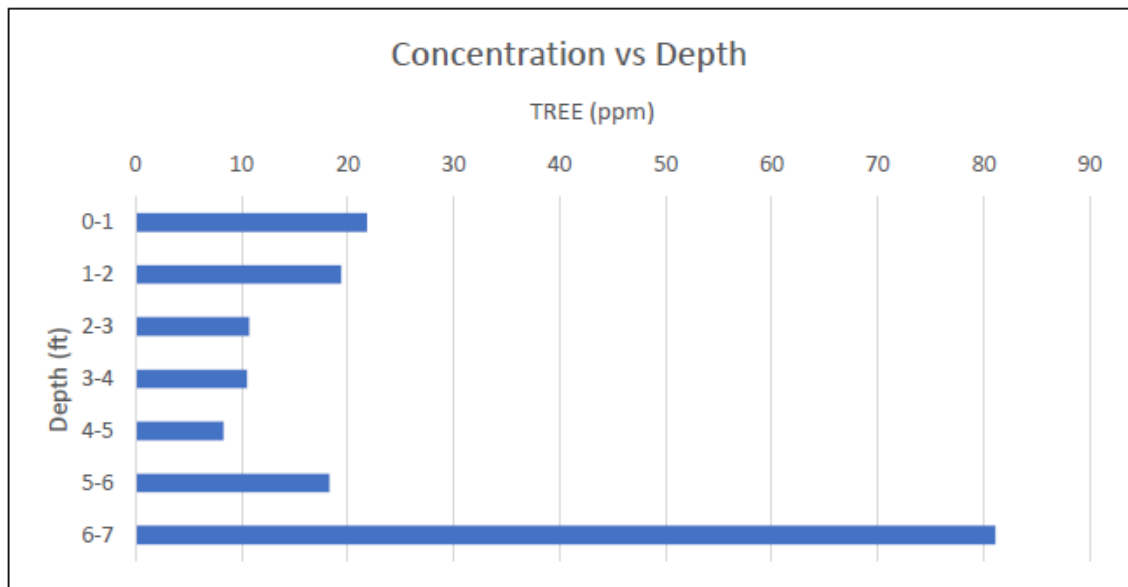


Рисунок 18. Загальний вміст РЗЕ у стратиграфічній колонці, що показує нелінійний розподіл концентрацій РЗЕ.

5.3.1 Trend Modeling (моделювання трендів)

Обмежена кількість даних щодо вертикального розподілу TREE у моделі Nagel зумовила необхідність використання **моделювання тренду** як базового контролю вертикальної варіації властивостей. Для цього в Petrel був побудований нелінійний поліном другого ступеня, що описує зв'язок концентрації TREE зі стратиграфічною глибиною у пласті.

Сім експериментальних значень концентрацій із Laudal (2017) [14] були імпортовані в Petrel для побудови кривої тренду. Використання методу найменших квадратів дозволило отримати поліноміальну функцію:

$$y = 58.9 - 33.3821x + 4.94643x^2$$

$$y = 58.9 - 33.3821x + 4.94643x^2$$

де

x – нормалізована глибина в межах пласта (0 – верх; 1 – низ),

y – концентрація TREE (ppm).

Основні параметри функції наведено у Таблиці 2.

Таблиця 2. Параметри функції вертикального тренду TREE.

Параметр	Значення
Кореляційний індекс	0.892
Коваріація	24.757
Поліноміальна функція	$y = 58.9 - 33.3821x + 4.94643x^2$

Для коректного застосування тренду в межах змінної товщини пласта Nagel були застосовані такі налаштування:

- **Trend weight = 1**, що забезпечує повну кореляцію моделі із заданою трендовою функцією.
- Глибина інтерпретується як **"Based on layer index"**, що дозволяє рівномірно масштабувати тренд на різну кількість вертикальних шарів.
- Оскільки Petrel автоматично розміщує мінімальні значення функції в нижній частині пласта, було застосовано параметр **"Inverse X-axis"** для правильного орієнтування тренду.
- Трендова крива нормалізована у діапазон **0–1**, що забезпечує узгодженість із діапазоном реальних значень TREE.

Створена тренд-модель забезпечує плавну інтерполяцію вертикального профілю TREE по всій площі моделі й дозволяє коректно поєднувати її з точковими даними, отриманими під час гірничих робіт.

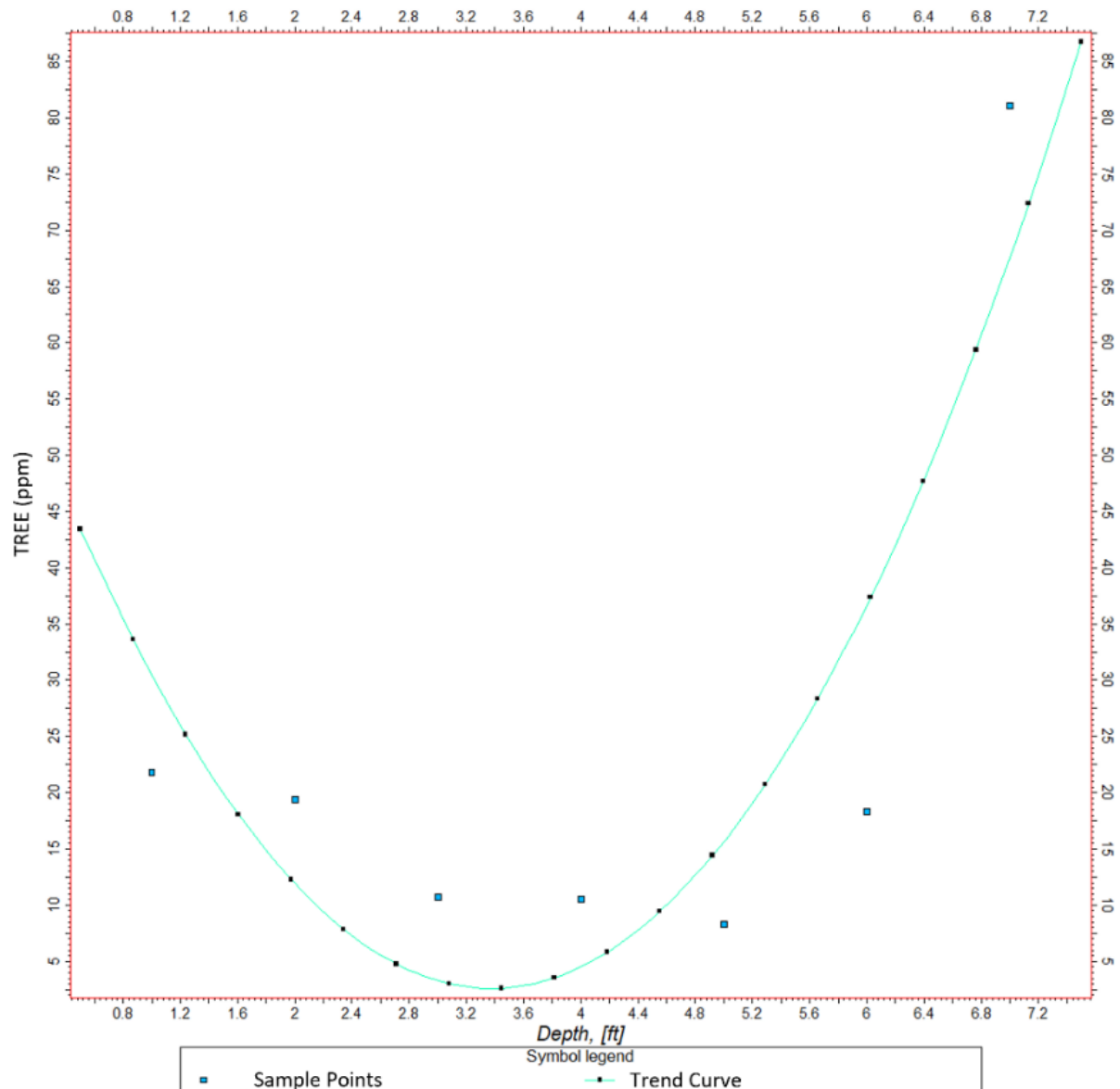


Рисунок 19. Розподіл концентрації дерев (TREE) у вугільному пласті Хагеля з глибиною від верхівки пласта до дна на осі X та TREE на осі Y.

5.3.2 Distribution (розповсюдження)

Розподіл TREE у межах 3D геоцелюлярної моделі був реалізований за допомогою алгоритму **Sequential Gaussian Simulation (SGS)**, який показав найкращі результати серед доступних методів Petrel.

1. Upscaling точкових даних

Першим етапом було проведення **upscaling** точкових даних TREE,

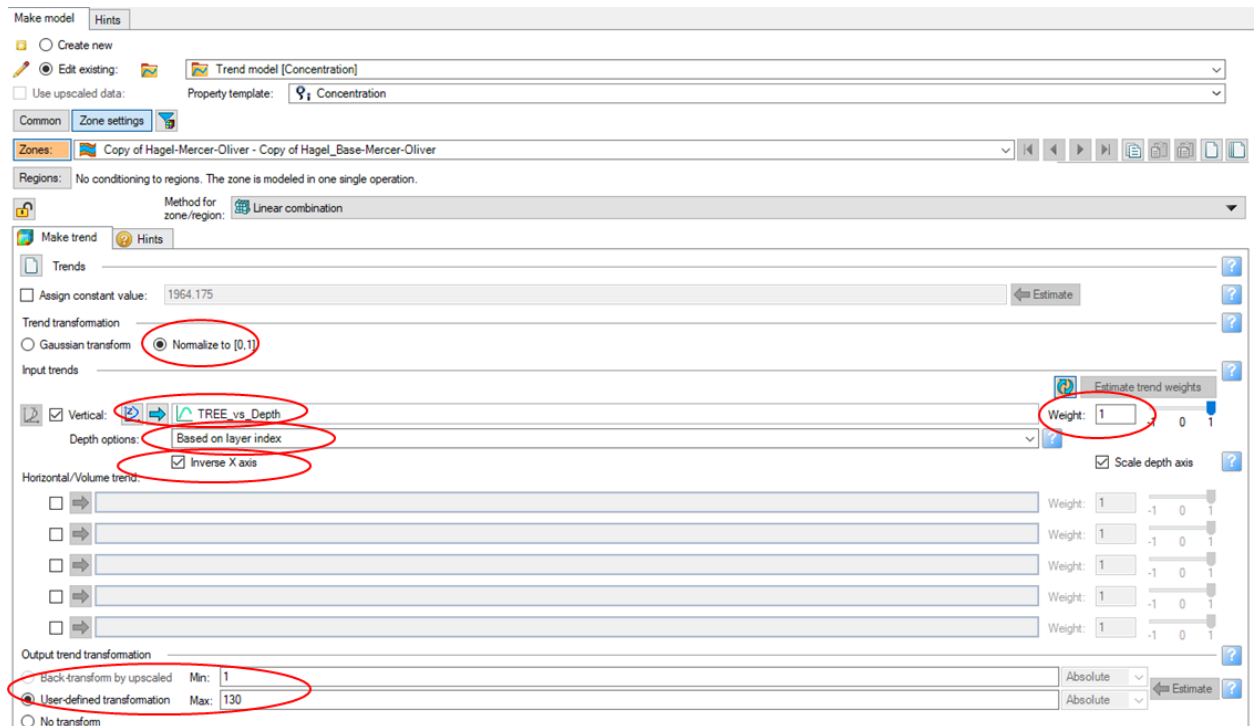


Рисунок 20. Моделювання трендів у Petrel з налаштованими виділеними параметрами.

отриманих із вибірки з відкритих гірничих робіт. Upscaling здійснювався за допомогою інструменту *Well log upscaling*, де:

- вхідними даними слугували атрибути точкових вибірок,
- результати усереднення були присвоєні відповідним осередкам моделі.

Отримані upscaled значення були використані як **жорсткі точки** під час моделювання.

2. Variogram Modeling

Через недостатній просторовий розподіл точок даних побудувати достовірні варіограми не вдалося. Тому були обрані такі параметри:

- тип варіограми: **spherical**,
- горизонтальний радіус (major/minor): **5000 ft** (умовне середнє значення),
- вертикальний радіус: **1 ft**, відповідно до частоти вертикального відбору проб.

Ці параметри забезпечують базовий контроль гладкості та ступеня кореляції розподілу TREE.

3. *Distribution Settings*

У вкладці Distribution задано:

- **діапазон концентрацій** – між 1 ppm (мінімум трендової кривої) і 141 ppm (максимум вибірки – Sample ID 32),
- **Distribution method: Standard**, що дозволяє поєднувати тренд і upscaled values,
- **Distribution from upscaled logs**, що забезпечує врахування наявних проб у моделюванні.

4. *Co-kriging і врахування тренду*

Для інтеграції трендової моделі з первинними даними було застосовано:

- **Collocated co-kriging**,
- Secondary variable: вертикальна функція (trend curve),
- Depth option: "Based on layer index",
- Secondary variable transformation: *Transform using input distribution*.

Таким чином, моделювання TREE поєднує локальні дані вибірок із глобальним вертикальним трендом, забезпечуючи реалістичний тривимірний розподіл концентрацій.

5.4 Аналіз та результати

Середнє просторове розподілення концентрацій TREE у межах модельної ділянки дало змогу визначити об'єми потенційно вилучуваних рідкісноземельних елементів для виділеного об'єму. У таблиці 3 наведено усереднені об'ємні показники TREE для стандартної комірки моделі розміром 100×100 футів по площі з вертикальним сумуванням.

Отримані значення TREE в окремому елементі модельної решітки дають уявлення про загальну кількість РЗЕ – лантанідів, скандію та ітрію – у відповідному об'ємі вугілля. У моделі не здійснювалася окрема 3D-дистрибуція для кожного з елементів, тому оцінка індивідуальних REE виконувалась шляхом застосування множників, побудованих на основі

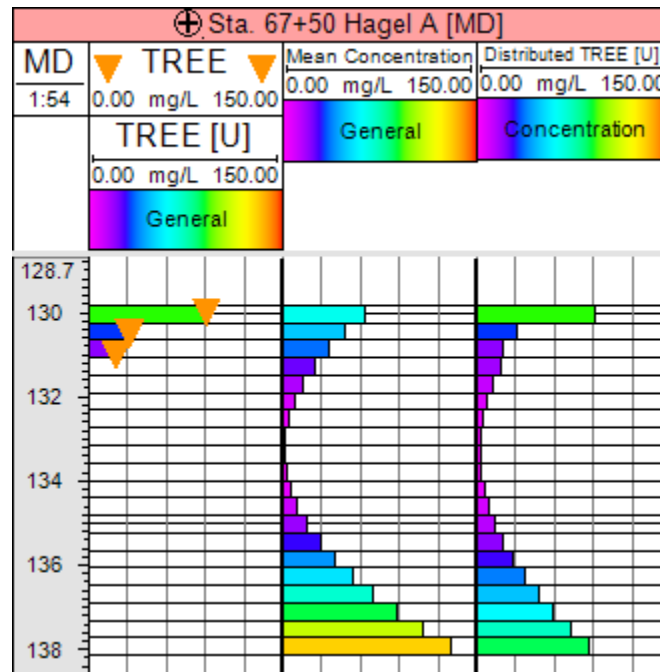


Рисунок 21. Поперечний переріз точки вибірки, що показує значення вибірки як вхідні дані для розподілів. Ліворуч) дані вибірки як вхідні точки (трикутники) та ці вибірки у масштабі. Посередині) Моделювання тренду, згенероване на основі моделі тренду та кінцевої розподіленої властивості для TREE у цьому місці.

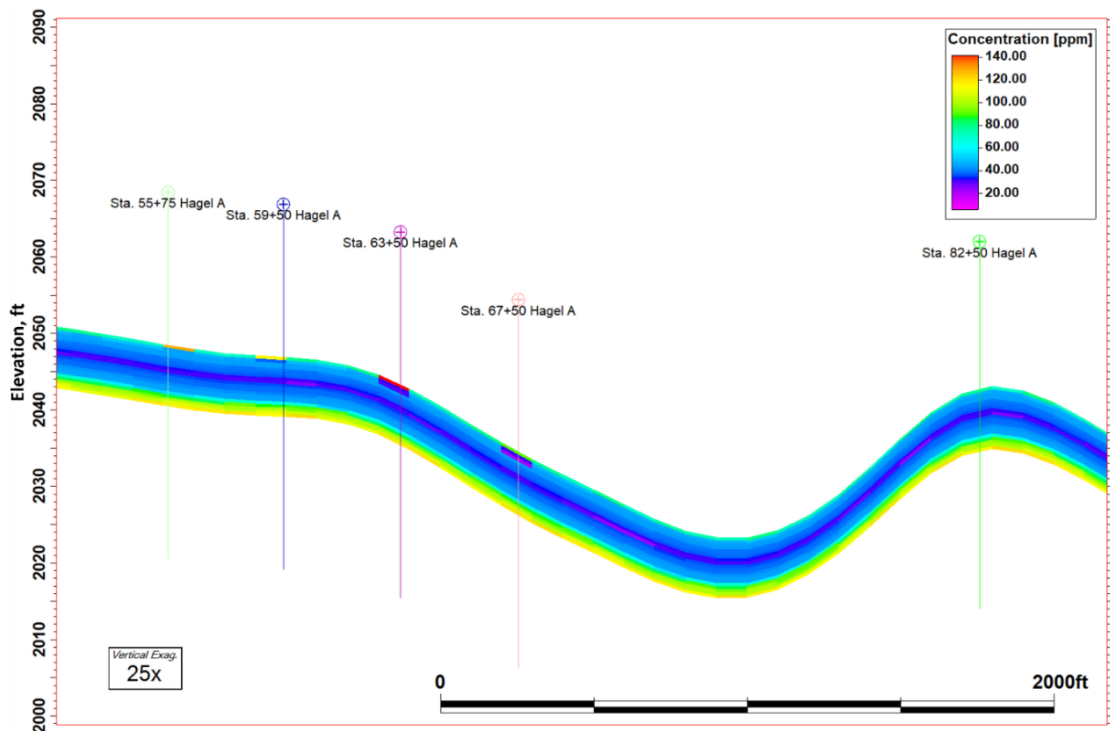


Рисунок 22 Перетин розподілу TREE.

Таблиця 3. Об'ємні значення TREE для однієї комірки моделі 100' × 100',
підсумовані по товщині пласта

Пласт	Середнє TREE (ppm)	Максимальне TREE (ppm)	Мінімальне TREE (ppm)	Середня товщина (ft)
Hagel	26	141	2.6	8.9

нормованого середнього розподілу REE, характерного для вибірки з ділянки моделювання.

На рисунку 23 представлено нормалізований розподіл REE за усіма лабораторними зразками лігніту пласта Hagel у межах AoI. Таблиця 4 містить середні значення концентрацій кожного елемента та їх нормалізовані коефіцієнти, які й використовувалися як множники під час оцінки загальної маси кожного REE у моделі.

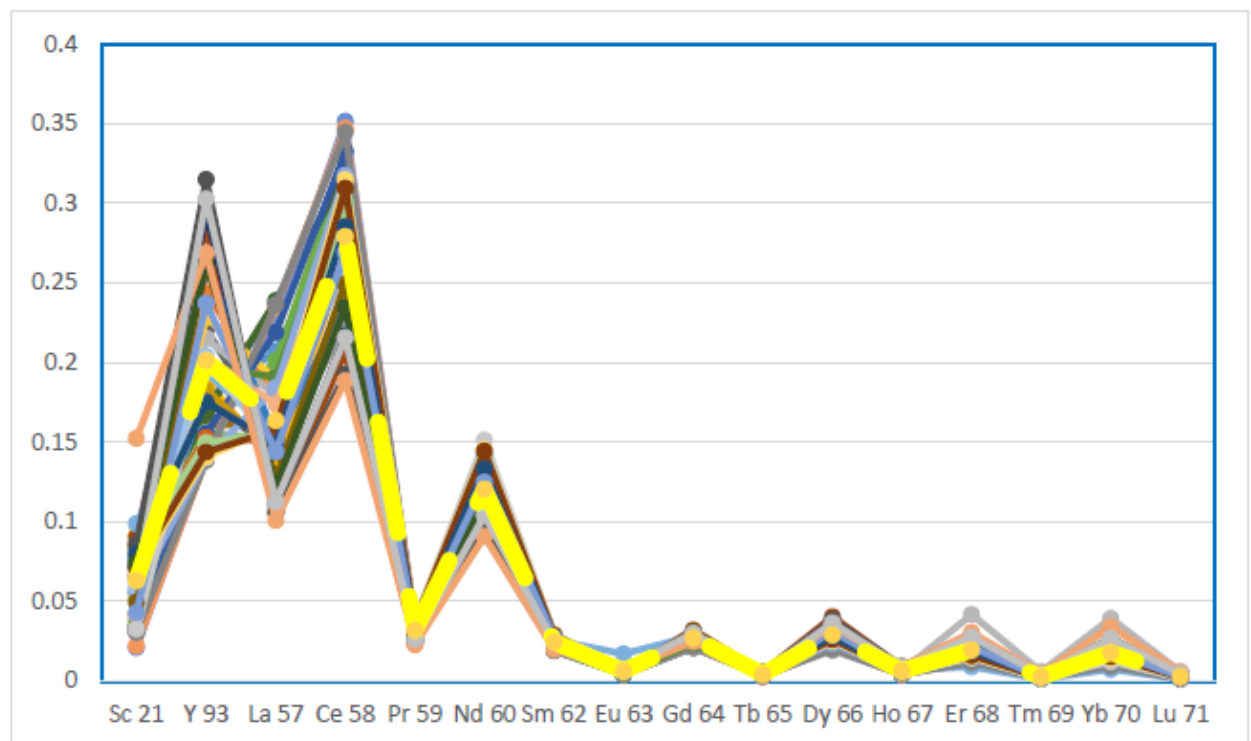


Рисунок 23. Розподіл РЕЕ, нормалізованих по всіх зразках у пласті Хагеля в області інтересу. Жовта пунктирна лінія посередині рисунка показує середнє значення всіх нормалізованих концентрацій.

Метод множників не забезпечує точності, аналогічної повноцінному моделюванню індивідуальних REE у 3D, проте дозволяє виконати достовірну орієнтовну оцінку загальної кількості елементів у межах моделі. Альтернативно, концентрації окремих REE можуть бути обчислені шляхом застосування калькуляторів у Petrel до розподіленого поля TREE, однак такий підхід значно трудомісткіший.

Таблиця 4. Середні концентрації окремих REE та нормалізовані значення

Елемент	Середня концентрація (ppm)	Нормоване значення
Sc	4.34	0.06
Y	11.54	0.20
La	9.92	0.16
Ce	17.58	0.28
Pr	2.05	0.03
Nd	7.81	0.12
Sm	1.59	0.02
Eu	0.41	0.01
Gd	1.69	0.03
Tb	0.27	0.00
Dy	1.77	0.03
Ho	0.38	0.01
Er	1.15	0.02
Tm	0.15	0.00
Yb	1.08	0.02
Lu	0.17	0.00
TREE	61.90	1.00

Для узагальнення отриманих результатів була використана **орієнтовна густина лігнітового вугілля 640 кг/м³** [43]. Підсумкові параметри TREE у моделі наведено в таблиці 5.

Таблиця 5. Середні концентрації TREE та об'ємні оцінки для усієї модельної області

Показник	Значення
Середня концентрація TREE (ppm)	26
Загальний об'єм моделі (м ³)	361,178,546
Оцінена маса вугілля (кг)	231,421,479,820
Загальна маса TREE (кг)	6,211,022

Таблиця 6. Загальна маса індивідуальних REE у межах модельної області

Елемент	Загальна маса (кг)
Sc	392,899
Y	1,250,836
La	1,016,424
Ce	1,733,745
Pr	198,353
Nd	747,968
Sm	152,344
Eu	38,647
Gd	167,737
Tb	27,058
Dy	179,653
Ho	38,666
Er	121,116
Tm	16,068
Yb	112,098
Lu	17,701

Хоча сумарні маси TREE у моделі є значними, необхідно враховувати, що значна частина території вже була відпрацьована у межах відкритих розробок (див. рис. 11), а отже, наведені величини **не відображають кількість REE in situ**, доступних для видобутку.

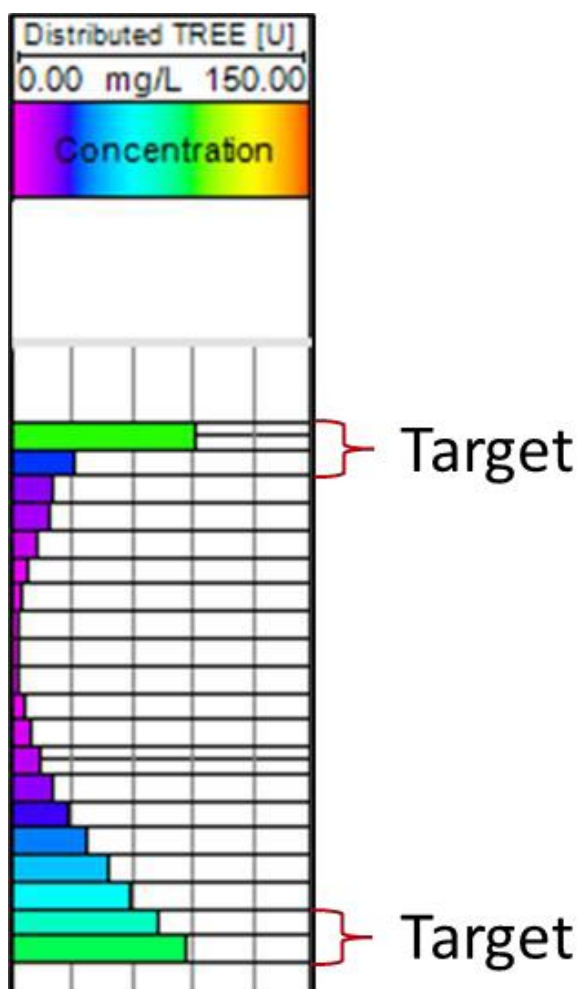


Рисунок 24. Зображення модельного вертикального розподілу ДЕРЕВ із зазначеними цільовими шарами.

Оцінка об'ємів TREE для верхньої та нижньої частин пласта

Отримані розподіли TREE по товщині пласта показують, що найбільш економічно перспективними є **верхня та нижня приблизно футові частини** пласта Nagel, де концентрації REE традиційно максимальні. З використанням калькуляторів у Petrel модель була обмежена лише цими шарами (приблизно 2 верхні та 2 нижні сіткові шари).

За цієї умови:

- загальна маса TREE у межах двох верхніх і двох нижніх шарів становить $\approx 2,733,865$ кг,

- що відповідає **приблизно 44 %** від загальної маси TREE в моделі,
- хоча ці шари складають лише **~ 20 % від загального об'єму пласта.**

Середня концентрація TREE при цьому:

- для всієї моделі: **26 ppm**,
- для лише граничних шарів: **59 ppm**,
- тобто більш ніж удвічі вища.

РОЗДІЛ 6.

АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Методологія визначення загального вмісту рідкоземельних елементів (TREEs) у лігнітовому вугіллі конкретного пласта показала, що вона є потенційно придатною для оцінки обсягу REE у районі, проте під час процесу моделювання виникає низка важливих аспектів. Одним із обмежень є кількість точок відбору зразків та їх просторовий розподіл, що ускладнює точне відображення просторової змінності концентрації REE. Це особливо помітно через наявність лише одного повного вертикального профілю вугілля пласта Nagel, який використовується як представницький для визначення вертикального розподілу у моделюванні. Використання одного вертикального тренду дає змогу отримати лише одну інтерпретацію. Хоча цей вертикальний тренд був єдиним у роботі Laudal (2017) [14], існували й інші часткові вертикальні профілі пласта, що можуть свідчити про те, що типовий “С” або “U” стиль розподілу не завжди є характерним для всього пласта.

Збір більшої кількості повних вертикальних профілів вугілля допоміг би оцінити ступінь змінності вертикального розподілу. Крім того, обмежена кількість вертикальних профілів разом із недостатнім покриттям території вибірками ускладнює визначення латеральної змінності, оскільки це перешкоджає використанню варіограм у процесі моделювання властивостей і може спотворювати дані уздовж площі відбору зразків.

Проблема, що виникає при 3D геологічному моделюванні пласта Nagel, є характерною і для інших великих вугільних пластів у басейні Віллістон. Подальший збір більшої кількості зразків із різних пластів басейну, спрямований на закриття прогалин у знаннях щодо вертикальної та латеральної просторової змінності, дозволить підвищити точність оцінки концентрації REE. Окрім цього, застосування альтернативних методів збору даних, таких як рентгенофлуоресцентний (XRF) та рентгенівський дифракційний (XRD) аналізи, аналіз більшої кількості елементів, включно з

іншими критичними мінералами, а також використання дротяних каротажних логів (wireline logs) допоможе покращити моделювання, забезпечуючи зв'язок між даними та моделлю поза межами окремих точок відбору зразків.

ВИСНОВКИ

Метою роботи було визначення методології оцінки концентрації рідкоземельних елементів (REEs) у вугіллі через 3D геологічне моделювання для більш точної оцінки підземних концентрацій. Досягнення цієї мети було забезпечене виконанням наступних завдань, і результати корелюються з ними наступним чином:

1. Огляд літературних джерел щодо поширення та концентрації РЗЕ у вугіллі США, особливо у басейні Віллістон.

Проведено детальний аналіз наукових публікацій та звітів NDGS, EERC та інших джерел. Було підтверджено, що лігнітові пласти басейну Віллістон містять помітні концентрації рідкоземельних елементів, зокрема у крайових зонах вугільних пластів. Цей огляд дозволив вибрати пласт Nagel як об'єкт для моделювання.

2. Збір та систематизація даних щодо складу та вертикального розподілу РЗЕ у пласті Nagel.

Зібрано та оброблено дані зразків TREEs, а також інформацію з NCRDS та вугільних каротажів. Систематизація дозволила визначити вертикальні та просторові особливості концентрації REE, підтверджуючи наявність “С” та “U”-подібних типів розподілу у межах пласта.

3. Розробка 3D геологічної моделі вугілля з урахуванням просторового розподілу РЗЕ.

Виконано побудову тривимірної моделі Nagel з використанням Petrel, включаючи структурні поверхні верхньої та нижньої межі пласта. Модель успішно інтегрувала точки зразків і вертикальні тренди TREEs, що дозволило відобразити просторовий розподіл рідкоземельних елементів.

4. Оцінка потенційно відновлюваних концентрацій РЗЕ у моделюваному пласті.

На основі створеної 3D моделі розраховано обсяги TREEs у межах моделюваної площі. Визначено, що верхні та нижні межі пласта містять

близько 44% загального обсягу REE при обсязі лише 20% пласта, що вказує на ефективні цільові зони для видобутку. Також оцінено масу окремих елементів рідкоземельних металів.

5. Надання рекомендацій щодо можливого використання отриманих результатів у плануванні видобутку РЗЕ.

Результати моделювання показують, що ефективна розробка повинна орієнтуватися на крайові зони пласта, де концентрація REE максимальна. Методологія, яка була застосована, може бути перенесена на інші лігнітові пласти басейну для покращення оцінки потенційних ресурсів рідкоземельних елементів.

Таким чином, всі поставлені завдання були виконані, а отримані результати підтверджують ефективність застосованої методики 3D геологічного моделювання для оцінки концентрацій рідкоземельних елементів у вугіллі.

Загальний висновок

На основі проведеного дослідження можна зробити наступні висновки:

1. Використовуючи наявні дані зразків, отримані NDGS, EERC та іншими організаціями, можливо застосувати методи 3D моделювання для створення просторового розподілу загального вмісту рідкоземельних елементів (TREEs).

2. Обмежені дані щодо TREEs у пласті вугілля Hagel були використані для оцінки обсягу TREEs у районі дослідження (Oliver County, North Dakota).

3. Використовуючи нормалізацію окремих REE по всіх зразках, можна оцінити приблизну кількість кожного окремого рідкоземельного елемента у районі.

4. Завдяки можливості ефективного виділення крайових зон пласта, де ймовірно відбуватиметься добування REE, можна спостерігати різницю у концентраціях і більш точно оцінювати потенційні обсяги REE порівняно з оцінкою всього пласта.

5. Успішне застосування цієї методології може слугувати відправною точкою для подальшого моделювання TREEs, яке можна перенести на інші лігнітові пласти регіону.

6. З постійним збором зразків REE у пласті Hagel та інших пластах, точність створення 3D геологічних моделей концентрації REE буде постійно покращуватись.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Taylor R.K., McLennan S.M. The Continental Crust – Its Composition and Evolution. Oxford: Blackwell, 1985. 312 p.
2. Long K.R., Van Gosen B.S., Foley N.K., Cordier D. The Principal Rare Earth Elements Deposits of the United States – A Summary of Domestic Deposits and a Global Perspective // U.S. Geological Survey Scientific Investigations Report. 2010. No. 2010-5220. 96 p.
3. U.S. Geological Survey. Rare earths–mineral commodity summaries 2016. 2016. URL: https://minerals.usgs.gov/minerals/pubs/commodity/rare_earths/mcs-2016-raree.pdf (дата звернення: 06.2017).
4. Bao Z., Zhao Z. Geochemistry of mineralization with exchangeable REY in the weathering crusts of granitic rocks in South China // Ore Geology Reviews. 2008. V. 33. P. 519–535.
5. Chegwiddden J., Kingsworth D.J. Rare earths—an evaluation of current and future. 2011. URL: www.tremcenter.org/index/php?option=com_attachments&task=download&id (дата звернення: 06.2017).
6. Chi R., Tian J. Weathered crust elution-deposited rare earth ores. New York: Nova Science Publishers, 2008.
7. Zygarlicke C.J. et al. Rare-earth elements (REEs) in U.S. coal-based resources–20 sampling, characterization, and round-robin interlaboratory study. 2019.
8. Ackman T., Ekmann J., Kirchner C., Lopert E., Pierre J. Rare earth elements in coal – the case for research and development into co-production with coal. Leonardo Technologies, Inc., 2012.
9. National Energy Technology Laboratory. Critical Minerals and Materials Program. URL: <https://www.netl.doe.gov/resource-sustainability/minerals-and-materials/program-overview/background> (дата звернення: 06.2023).

10. Murphy E.C., Moxness L.D., Kruger N.W., Maike C.A. Rare earth element concentrations in the Harmon, Hanson, and H lignites in Slope County, North Dakota // Report of Investigation No. 119, North Dakota Geological Survey.
11. Kruger N.W., Moxness L.D., Murphy E.C. Rare earth element concentrations in Fort Union and Hell Creek Strata in western North Dakota // Report of Investigation No. 117, North Dakota Geological Survey.
12. Critical Minerals and Materials Program Annual Accomplishments // NETL. URL: <https://netl.doe.gov/resource-sustainability/critical-minerals-and-materials/accomplishments> (дата звернення: 10.03.2021).
13. Alvin M.A. Rare Earth Elements from Coal & Coal By-Products Program Overview. 2017.
14. Laudal D. Evaluation of rare earth element extraction from North Dakota coal-related feed stocks [thesis]. 2017.
15. Seredin V.V., Dai S. Coal deposits as potential alternative sources for lanthanides and yttrium // International Journal of Coal Geology. 2012. V. 94. P. 67-93.
16. Ketris M.P., Yudovich Y.E. Estimation of Clarkes for carbonaceous biolithes: world average for trace element contents in black shales and coals // International Journal of Coal Geology. 2009. V. 78. P. 135-148.
17. Finkelman R.B. Trace and minor elements in coal // Engel M.H., Macko S.A. (eds.) Organic Geochemistry. 1993. P. 593-607.
18. Eskenazy G. Rare-earth elements in some coal basins of Bulgaria // Geologica Balcanica. 1978. V. 11. P. 83-89.
19. Eskenazy G. Rare earth elements and yttrium in lithotypes of Bulgarian coals // Organic Geochemistry. 1987. V. 11. P. 83-89.
20. Eskenazy G. Zirconium and hafnium in Bulgarian coals // Fuel. 1987. P. 1652-1657.
21. Eskenazy G. Rare earth elements in a sampled coal from the Pirin Deposit, Bulgaria // International Journal of Coal Geology. 1987. V. 7. P. 301-314.

22. Eskenazy G. Geochemistry of rare earth elements in Bulgarian coals: *Annuaire de l'Université de Sofia "St. Kliment Ohridski," Faculté de Géologie et Géographie. Livre 1-Géologie*. 1995. V. 88. P. 39-65.
23. Eskenazy G. Aspects of the geochemistry of rare earth elements in coal—an experimental approach // *International Journal of Coal Geology*. 1999. V. 38. P. 285-295.
24. Eskenazy G. Sorption of trace elements on xylain—an experimental study // *International Journal of Coal Geology*. 2015. V. 150-151. P. 166-169.
25. Eskenazy G.M., Mincheva E.I., Rousseva D.P. Trace elements in lignite lithotypes from the Elhovo coal basin // *Comptes rendus de l'Académie bulgare des Sciences*. 1986. V. 39, No. 10. P. 99-101.
26. Seredin V.V., Shpirt M.Y. Rare earth elements in the humic substance of metalliferous coals // *Lithology and Mineral Resources*. 1999. V. 52. P. 428-433.
27. Pedrot M., Dai A., Davranche M. Dynamic structure of humic substances—rare // *J. Colloid Interface Sci*. 2010. V. 345. P. 206-213.
28. Davranche M. et al. Rare earth element patterns: a tool for identifying trace metal sources during wetland soil reduction // *Chemical Geology*. 2011. V. 284. P. 127-137.
29. Aide M.T., Aide C. Rare earth elements—their importance in understanding soil genesis // *International Scholarly Research Network*. 2012.
30. Seredin V. Rare earth element-bearing coals from the Russian Far East deposits // *International Journal of Coal Geology*. 1996. V. 30. P. 101-129.
31. Dai S. et al. Mineralogy and geochemistry of boehmite-rich coals—new insights from the Haerwusu Surface Mine, Jungar Coalfield, Inner Mongolia, China // *International Journal of Coal Geology*. 2008. V. 74. P. 185-202.
32. Dai S. et al. Mineralogy and geochemistry of the No. 6 coal (Pennsylvanian) in the Junger Coalfield, Ordos Basin, China // *International Journal of Coal Geology*. 2006. V. 66. P. 253-270.

33. Royce C.F. Sedimentologic analysis of the Tongue River-Sentinel Butte interval (Paleocene) of the Williston Basin, western North Dakota // *Sedimentary Geology*. 1970. V. 4. P. 19-80.
34. Jacob A.F. Geology of the upper part of the Fort Union Group (Paleocene), Williston Basin, with reference to uranium // *Report of Investigation No. 58*, North Dakota Geological Survey. 1976.
35. Murphy E.C. et al. North Dakota Stratigraphic Column // *Miscellaneous Series 91*, North Dakota Geological Survey. 2009.
36. Murphy E.C. The Lignite Reserves of North Dakota // *Report of Investigation No. 104*, North Dakota Geological Survey. 2006.
37. Murphy E.C. et al. The lignite resources of North Dakota // *Report of Investigation No. 105*, North Dakota Geological Survey. 2006.
38. Ellis M.S. et al. Coal Resources, Williston Basin // *Professional Paper 1625-A*, U.S. Geological Survey. 1999.
39. Murphy E.C. Lignite Reserves Hazen 100K Sheet, North Dakota, North Dakota Geological Survey. 2007.
40. Murphy E.C., Moxness L.D., Kruger N.W. Elevated Critical Mineral Concentrations Associated with the Paleocene-Eocene Thermal Maximum, Golden Valley Formation, North Dakota, North Dakota Geological Survey. 2023.
41. Geology, Energy & Minerals Science Center. National Coal Resources Data System (NCRDS) // U.S. Geological Survey. 31 May 2022. URL: <https://www.usgs.gov/centers/geology-energy-and-minerals-science-center/science/national-coal-resources-data-system> (дата звернення: 2023).
42. Schaffer B.N. An Assessment of the Economic Potential of Lignite and Leonardite Resources in the Williston Basin, North Dakota // *Open-File Report 2020-1135*, U.S. Geological Survey. 2021.
43. Tapco Inc. Bulk Material Density Table. URL: https://www.tapcoinc.com/images/uploads/Tapco_Catalog_09_p88-94