

## Résumé de thèse

Le stockage géologique du  $CO_2$  dans des réservoirs aquifères de type calcaire et grès, du charbon non exploité est une des solutions envisagées pour réduire les émissions de gaz à effet de serre dans l'atmosphère. Cependant, l'injection de  $CO_2$  peut perturber les propriétés pétrophysiques (porosité et perméabilité), minéralogiques (transformations) et mécaniques (déformations, résistance à la rupture) des roches réservoir (calcaire, grès, charbon). Dans le cas du charbon, l'injection de  $CO_2$  peut également se traduire par des phénomènes de gonflement de la matrice liés au processus d'adsorption. L'objectif de ce travail de thèse est de traduire en termes de modèles phénoménologiques les comportements et les couplages chimio-poromécaniques des roches réservoir de type charbon.

Dans ce travail, nous nous sommes focalisés en particulier sur l'étude de l'injection de  $CO_2$  dans le charbon. Pour cela, deux modèles homogénéisés de porosité du charbon ont été développés avec la prise en compte du phénomène d'adsorption, connu pour être le principal mécanisme de production ou de séquestration de  $CO_2$  dans de nombreux réservoir de charbon. Le premier modèle permet d'étudier le comportement poro-élastique du charbon pour une injection simple de  $CO_2$  et le second permet d'étudier le comportement poro-élastique du charbon pour une injection de  $CO_2$  avec une récupération assistée de méthane  $CH_4$ . Le processus d'adsorption est classiquement modélisé à l'aide de l'isotherme d'adsorption de Langmuir (pour un gaz dans le premier modèle et pour deux gaz dans le second modèle).

L'implantation de ces modèles dans le Code\_Aster (code d'analyse de calcul de structures entièrement couplé THM, développé par Electricité De France - EDF) nous a permis de faire des simulations numériques de stockage de  $CO_2$  dans le charbon. Pour une injection simple du  $CO_2$  dans le charbon (premier modèle), la matrice du charbon s'est comportée de deux façons différentes : elle gonfle (ce qui induit une diminution de la porosité du charbon) avec la prise en compte du phénomène d'adsorption et se contracte (ce qui induit une augmentation de la porosité du charbon) dans le cas contraire. Etant en bon accord avec les résultats de la littérature spécialisée, cela montre la capacité du modèle à prédire le comportement poro-élastique du charbon durant l'injection de  $CO_2$ . Toujours avec le premier modèle, nous avons en particulier étudié l'influence des propriétés hydro-mécaniques du charbon (coefficient de Biot, module de Young/module d'incompressibilité), les paramètres d'adsorption de Langmuir et la pression initiale du liquide interstitiel dans le charbon, sur la réponse du charbon à l'injection du  $CO_2$ . Dans le cas d'une récupération assistée du méthane  $CH_4$  (le second modèle), un couplage du Code\_Aster et un code de transport réactif HYTEC (HYdrological Transport coupled with Equilibrium Chemistry, développé par MINES Paris Tech) était nécessaire pour gérer surtout le calcul des pressions partielles des deux gaz ( $CO_2$  et  $CH_4$ ) à chaque pas de temps. Un travail de développement numérique sur les deux codes de calcul était alors nécessaire. Ce travail de thèse a proposé une méthode de couplage entre les deux codes (Code\_Aster et HYTEC) dont les techniques sont largement décrites dans le manuscrit.

**Mots-clés :** Charbon, Injection de  $CO_2$ , Modélisation numérique, Isotherme de Langmuir, Code\_Aster, HYTEC, Perméabilité intrinsèque, Porosité, Propriétés Hydro-Mécaniques, Récupération de méthane.

## Abstract thesis

The geological storage of  $CO_2$  in aquifers reservoirs such as limestone and sandstone, coal is a possible way to reduce greenhouse gas emission into the atmosphere. However, the injection of  $CO_2$  may modify petrophysical (porosity and permeability), mineralogical (transformations) and mechanical (deformations, strength) properties of reservoir rocks (limestone, sandstone, coal). In the case of coal, the injection of  $CO_2$  can also induce matrix swelling due to adsorption processes. The focus of this thesis is to translate in terms of phenomenological models, the behaviors and chemo-poromechanical coupling of reservoir rocks of coal type.

In this work, we focused particularly on the study of  $CO_2$  injection into coal. For this, two models of homogenized coal porosity have been developed by taking into account the adsorption phenomenon, known to be the main mechanism of production or sequestration of  $CO_2$  in many coal reservoirs. The first model allows the study of the poroelastic behavior of coal in the case of a single injection of  $CO_2$ , and the second model allows the study of the poroelastic behavior of coal in the case of an injection of  $CO_2$  with methane  $CH_4$  recovery. The adsorption process is classically modelled using Langmuir's isotherm (for one gas in the first model and for two gases in the second model).

The implementation of these models in Code\_Aster (a fully coupled Thermo-Hydro-Mechanical analysis code for structures calculations, developed by Electricity of France - EDF) allowed us to make numerical simulations of  $CO_2$  storage in coal. For a single injection of  $CO_2$  into coal (first model), the coal matrix behaved in two different ways: it swells (resulting in the decrease of coal porosity) when the adsorption phenomenon is taken into account and shrinks (resulting in the increase of coal porosity) otherwise. Being in good agreement with the results in specialized literature in this field, it shows the ability of the model to predict the poroelastic behaviour of coal to  $CO_2$  injection. Also with the first model, we studied particularly through numerical simulations the influence of coal's hydro-mechanical properties (Biot's coefficient, bulk modulus), Langmuir's adsorption parameters and the initial liquid pressure in rock mass during  $CO_2$  injection in coal. In the case of methane recovery (second model), a coupling of Code\_Aster and a reactive transport code, HYTEC (Hydrological Transport coupled with Equilibrium Chemistry, developed by Mines Paris Tech) was needed to handle the above calculation of partial pressures of the two gases ( $CO_2$  and  $CH_4$ ) at each time step. Digital development work on the two computers codes (Code\_Aster and HYTEC) was then necessary. This thesis proposed a method of coupling between the two codes whose techniques are widely described in the manuscript.

**Key words:** Coal,  $CO_2$  injection, Numerical modelling, Langmuir's isotherm, Code\_Aster, HYTEC, Intrinsic permeability, Porosity, Hydro-mechanical properties, Methane recovery.