

*Jean-Charles de HEMPTINNE*

<b>1. CURRICULUM VITAE</b>	<b>2</b>
<b>2. ENCADREMENT SCIENTIFIQUE ET TECHNIQUE</b>	<b>5</b>
<b>3. PUBLICATIONS</b>	<b>7</b>
<b>Rapports IFP:</b>	<b>7</b>
<b>Brevets IFP</b>	<b>9</b>
<b>Sélection des participations à congrès internationaux</b>	<b>9</b>
<b>Journaux avec relecture:</b>	<b>10</b>
<b>Rédaction d'ouvrage:</b>	<b>Erreur ! Signet non défini.</b>
<b>4. Mon Projet Professionnel: Transmission des nouveaux acquis de la recherche</b>	<b>13</b>

# 1. CURRICULUM VITAE

**NOM** : Jean-Charles de HEMPTINNE  
**NAISSANCE** : Leuven (Belgique), le 15 Juin, 1962  
**LANGUES** : Parfaite connaissance du Français, l'Anglais et le Néerlandais;  
bonne compréhension de l'Allemand

## **DIPLOMES PRINCIPAUX**

**2000:** Habilitation à Diriger des Recherches (U. Claude Bernard, Lyon I) sur le thème :  
« *Les méthodes thermodynamiques en génie pétrolier* »

**1985 - 1990** : Massachusetts Institute of Technology  
Ph. D. in Chemical Engineering.  
Travail de thèse: « *Sulfur Dioxide Absorption on Limestone: Mechanisms and Effect of Promoters* »

**1980 - 1985** : Katholieke Universiteit Leuven  
Diplôme d'ingénieur chimiste (avec distinction)

## **EXPERIENCE PROFESSIONNELLE**

**Depuis 1991 : Ingénieur de recherche à l'IFP dans le département de thermodynamique**  
**Depuis 2000 : Enseignant chercheur à IFP-School**  
**Depuis 2009 : Professeur IFP-School**  
**Depuis 2010 : titulaire de la chaire de la fondation Tuck « Thermodynamique pour les carburants issus de la biomasse »**

## **AXES DE RECHERCHE:**

Expérimentation

- 1991 - 2000: Participation aux études expérimentales d'équilibre de phases pour les fluides de gisement.

Propriétés de transport

- Mesure et développement de modèles de viscosité pour les huiles riches en asphaltènes (thèse Werner)

Equations d'état:

- Etude comparative de la qualité des prédictions volumiques d'une sélection d'équations d'état dans des conditions de hautes pressions et hautes températures.
- Description des équilibres eau- hydrocarbures avec des constantes de Henry (thèse Dhima)
- Consultant interne de la direction industrielle (maintenant AXENS) concernant le choix des modèles thermodynamiques pour la simulation des procédés IFP.
- Étude des comportements de phases de fluides de forage dans des conditions extrêmes (méthodes de contribution de groupe; thèse Bureau)
- Les équations d'état moléculaires: utilisation de SAFT, par contributions de groupes, pour les constituants polaires ou associatifs (thèse Tamouza, Mourah, Nguyen; plusieurs stages, un post-doc)
- Application des concepts issus des équations d'état théoriques pour application aux électrolytes avec solvants mixtes (thèse Inchekel)

Algorithmes:

- Utilisation de méthodes de minimisation globale en vue de réaliser des calculs d'équilibre de phases

Cristallisation:

- Encadrement d'un stagiaire CSN réalisant ses travaux à l'Université de Lyngby (Danemark) sur le thème de la cristallisation des Xylènes
- Mise au point de modèle de cristallisation pour les besoins du procédé Liquefin

Outils de simulation thermodynamique

- 1997 - 2002 : Collaboration au programme international CAPE-OPEN comme expert en thermodynamique. Ce programme a été repris dans le cadre du CO-Lan.
- Depuis 2002 : Responsable de la mise en place d'une nouvelle bibliothèque de calcul thermodynamique en C++ (CARNOT), qui doit servir pour toutes les applications IFP.

## ENSEIGNEMENT:

**1994 à 2009** : Professeur associé à l'ENSPM

**Depuis 2009** : Professeur IFP-School

**2000 à maintenant:** Enseignant chercheur

- Responsable de l'Unité d'Enseignement "Thermodynamique" dans les sections RIG Raffinage Ingénierie Gaz) (42 heures)
- pour le cours de thermodynamique à l'ENSPM (Ecole Nationale Supérieure du Pétrole et des Moteurs) dans les sections RIG Raffinage Ingénierie Gaz) (42 heures) et DEA (Diplôme d'Etude Approfondie) (30 heures)
- 2002: mise en place de nouveaux enseignements pour la formation continue (ENSPM-FI) et pour les actions d'essaimage de l'ENSPM (YUKOS, Russie) -2004
- 2001-2004: Participation au projet e-formation de l'ENSPM en vue du développement d'outils logiciels afin de permettre une meilleure compréhension de phénomènes physiques complexes à la lumière de leurs applications
- 2001-2006: Responsable délégué du cycle DEA (MasterII) "Cinétique Chimique", Option "Modélisation" (en partenariat avec Paris VI)
- Depuis 2006: Responsable IFP de la Spécialité "Catalyse & Procédé", Mention "Procédés" dans le Master "Sciences et Technologies" en partenariat avec l'Ecole de Chimie Lille et l'Ecole Centrale Lille.
- 2008: mise en place de nouveaux enseignements pour la formation continue (IFP-TRAINING) et pour les actions d'essaimage de l'ENSPM (PDVSA, Vénézuéla)
- Tuteur école de plusieurs étudiants ingénieur en apprentissage (trois par an, dans des sociétés telles Technip, Air Liquide, TOTAL, Paragon-Litwin, Axens, IFP,...)

## ANIMATION SCIENTIFIQUE:

*Membre du conseil scientifique* de plusieurs conférences:

- *Les premières journées nationales du Génie des Procédés*, Tlemcen (Algérie) les 15 et 16 novembre 2005
- *Ière conférence internationale sur la Thermodynamique de l'Environnement et le développement durable*, Tlemcen (Algérie) les 6,7 et 8 mai 2008
- *GP 2009 (Marseille, déc 2009), GP 2011(Lille, déc 2011), GP 2013 (Lyon, nov 2013)*
- *Thermodynamics 2011* (Athènes, 29Aout – 1 septembre 2011)

*Organisateur principal* et membre du comité scientifique des conférences internationales

- *"Thermodynamics 2007"*, à l'IFP (27-29 septembre 2007)
- « *Industrial Use of Molecular Thermodynamics* » (*InMoTher*) à Lyon, 19-20 Mars 2012
- *"Industrial Use of Thermodynamics"*, session dédiée à l'industrie dans le congrès ESAT, Eindhoven, Juillet 2014

*Responsable* du groupe de travail Thermodynamique au sein de la SFGP (réunion de lancement le 8 janvier 2009) depuis environ 2 journées thématiques par an.

*Orateur invité* à la conférence 'EQUIFASE 2009' (17-21 octobre 2009)

1993 - 1998: *Chef de projet ARTEP* (regroupant Elf, TOTAL, Gaz de France et l'IFP) concernant l'étude thermodynamique des systèmes eau-hydrocarbures.

1999 – 2006 : *Promotion du Club Thermodynamique* à l'IFP,;

*Rapporteur* de jurys de thèse:

- Lallemand: "Modélisation thermodynamique des mélanges eau- méthanol - hydrocarbures" U. d'Aix - Marseille II, Octobre 1998
- Benzaghrou: "Une approche pour l'utilisation semi-prédictive de l'équation d'état SAFT. Application aux hydrocarbures, au dioxyde de carbone, aux alcools, à l'eau et à leurs mélanges", U. Paris 13, Mars 2001

- Bergin: "Prévision de la solubilité des hydrocarbures dans l'eau en fonction de la température et de la pression", U. Blaise Pascal, février 2002
- Marche: "Détermination des solubilités mutuelles des systèmes binaires eau - hydrocarbures à température élevée", U. Claude - Bernard, Lyon I, Décembre 2002
- Millot: "Etude des phénomènes de solvatation dans les solutions d'électrolytes. Application à la modélisation des Propriétés Thermodynamiques par l'intermédiaire d'une équation d'état", ENSTA, Décembre 2003
- Blouet: "Utilisation d'une méthode électrochimique pour la détermination simultanée de coefficients d'activité et d'énergies de transfert dans des solutions non-aqueuses d'électrolytes et dans des mélanges de solvants ", Décembre 2005
- Shah: "Propriétés interfaciales contrôlant la sécurité du stockage géologique des gaz acides", UPPA, Juillet 2008
- Tihic: "Group Contribution sPC-SAFT Equation of State", Technical University Denmark, Septembre 2008
- Belkadi: "Modélisation de la matière avec l'équation SAFT pour la prédiction des propriétés thermodynamiques des fluides complexes à travers SIMULIS THERMODYNAMICS", U. Toulouse, Septembre 2008
- M. Riaz : "distribution of complex chemicals in oil-water systems" (Danish Technical University), décembre 2011
- J. Qian: "Développement du modèle E-PPR78 pour prédire les équilibres de phases et les grandeurs de mélange de systèmes complexes d'intérêt pétrolier dans de larges gammes de température et de pressions », ENSIC, décembre 2011
- F. Lucille : « Caractérisation thermodynamique des systèmes complexes CO<sub>2</sub>-eau-impuretés mis en jeu dans des procédés d'absorption de dioxyde de carbone issu des fumées de combustion » (Pau, 31 Octobre 2012)

*Membre de jurys de thèse (en plus des thèses encadrées directement):*

- Portha, ENSIC: "Méthodologie pour tenir compte de l'impact environnemental d'un Procédé lors de sa Conception", novembre 2008
- Hajjaji : « Analyse de cycle de vie exergétique de systèmes de production d'hydrogène », ENSIC, 14 janvier 2011 : président
- Chien-Bin Soo : « Experimental measurements of biofuel-related, associating compounds and modeling using the PC-SAFT equation of state" Ecole des Mines de Paris, 15 juin 2011
- L. Heintz: "Systemic approach and decision process for sustainability in chemical engineering: Application to computer aided product design", ENSIACET, Toulouse, 23 octobre 2012
- O. Touré, U. Blaise Pascal, Clermont-Ferrand, Janvier 2014

*Membre de jurys de HDR :*

- P. Tobaly, Paris 13: "", décembre 2008
- J-P Passarello, Paris 13: "Contribution au développement d'un modèle prédictif applicable aux fluides pétroliers", Mai 2009
- K. Ballerat-Busserolles, U Blaise Pascal (Clermont-Ferrand) , octobre 2013
- R. Privat, ENSIC : « Développement d'équations d'état pour prévoir le comportement thermodynamique de la matière : de la théorie classique aux théories modernes, que reste-t-il à faire ? », décembre 2013

Participation à la *traduction* anglaise de l'ouvrage de Jean VIDAL: "Thermodynamique; Application au génie chimique et à l'industrie Pétrolière" (Editions Technip)

*Relecteur* pour le compte de plusieurs revues avec comité de lecture de niveau international:

- Fluid Phase Equilibria
- Journal of Chemical & Engineering Data
- Industrial & Engineering Chemistry Research
- Oil & Gas Science & Technology

*Editeur* invité du numéro spécial

- 'Oil & Gas Science & Technology' issu du congrès international 'Thermodynamics 2007' (Vol 63, N°3, Mai-Juin 2008.)
- 'Oil & Gas Science & Technology' issu du congrès international 'InMoTher 2012' (Vol 68, N°2, Mars-Avril 2013.)

- Chemical Engineering Research & Design, numéro spécial « Thermodynamics and Transport Properties », en cours

Dans le cadre de conférences internationales, participation à l'*animation de workshop*

- 'Global CAPE-OPEN' à l'occasion de la conférence internationale PPEPPD, Kurashiki, 2001
- 'use of CAPE OPEN tools in the chemical industry' à l'occasion de la conférence internationale PPEPPD, Salt Lake City, 2004

## **PARTICIPATION A DES ASSOCIATIONS PROFESSIONELLES:**

Membre de l'association des Alumni de MIT  
 Membre des sociétés savantes : AFTP, SFGP, AIChE  
 Membre actif de l'association ALET (Aide Logicielle à l'Enseignement de la Thermodynamique)  
 Représentant français de la SFGP (Société Française du Génie des Procédés) dans le 'Working Party of Thermodynamics and Transport Properties' de l'EFCE (European Federation of Chemical Engineers)

## **2. ENCADREMENT SCIENTIFIQUE ET TECHNIQUE**

### **Thèses:**

- A. Werner : " Viscosité des fluides pétroliers riches en produits lourds. Mesure et modélisation " (Université de Pau et des Pays de l'Adour), 1996  
 A. Dhima : " Etude de la solubilité de mélanges gazeux dans l'eau sous haute pression " (Université Claude Bernard, Lyon ), 1998  
 N. Bureau : « Etude des interactions entre fluides de forage et fluides de gisement » (Université Claude Bernard, Lyon ), 2002  
 S. Tamouza : « Evaluation d'une équation d'état basée sur la mécanique statistique » (Université Paris 13 ), soutenu le 24 septembre 2004, avec les félicitations du jury  
 R. Inchekel: "Application des équations d'état SAFT et CPA aux électrolytes" (ENSMP), soutenu le 30 janvier 2008  
 M. Mourah: "Application de l'équation d'état SAFT aux équilibres de phases intervenant dans la synthèse ou l'utilisation de biocarburants" (Université Paris 13 , soutenu décembre 2009)  
 J. Rozmus: "Equation d'état prédictive pour l'absorption du CO2 dans les amines" (Université Paris VI, soutenu avril 2012)  
 T.B. Nguyen : « description de fluides issus de la biomasse » (Université Paris VI, en cours)  
 H.K. Trinh : « Prédiction des équilibres d'hydrotraitement de biomasse par PPC-SAFT » (Université Paris 13, en cours)

### **Visiteur Scientifique:**

- D. Nichita : (ICPT, Roumanie). Deux travaux sont issus de cette collaboration :  
 « Efficient Phase Equilibrium Calculation for Compositional Simulation » (présenté au AIChE Spring Meeting, New Orleans, LA, March 10-14 2002)  
 "Isochoric Phase Stability Analysis and flash calculations" (présenté au AIChE Spring Meeting, New Orleans, LA, March 10-14 2002)  
 Y. Lin : (IVC-SEP, DTU) "Multicomponent equation of state for electrolytes" (présenté à "Thermo International, Boulder, CO, July 30 – August 4, 2006)  
 J-M Ledanois: (Professeur visiteur de l'Université Simon Bolivar, Caracas, de septembre 2008 à Août 2009) pour la rédaction d'un ouvrage intitulé "Use of (Phase Equilibrium)Thermodynamic Calculations for Petrochemical Applications"

### **Post-Doc:**

- D. Nguyen Huynh (novembre 2008-octobre 2009): étude de l'utilisation d'outils moléculaires pour la mise au point d'équation d'état prédictives pour molécules à multi-sites polaires (biocarburants)

### **Maître d'apprentissage:**

R. Huyghe : Etudiant ingénieur RIG, apprenti à l'IFP de Septembre 1998 - Mai 2000. Le sujet concernait la réponse à des demandes d'étude thermodynamiques provenant du centre de résultat "Raffinage - Pétrochimie" à l'IFP.

L. Grandjean : Etudiant ENEP, apprenti IFPEN de septembre 2011 à décembre 2012. Le travail est réalisé dans le cadre de la chaire « thermodynamique pour les carburants issus de la biomasses ».

### **Stages (sélection):**

N. Tokes (Tempus, 1992) : « Détermination des points de bulle de mélanges méthane - hydrocarbures lourds »

M. Schaldemose (Master, 1993) : « Comparison of four correlations predicting the viscosity of dense natural gas »

A. Aubertin (maîtrise, U. de Nancy, 1996) : « Comparaison des modèles de viscosité de PRO II pour des coupes lourdes saturées en hydrogène »

A. Aubertin (maîtrise, U. de Nancy 1997) : « Prédiction de la viscosité de bruts lourds et RSV à haute température »

N. Berthezene (DEA, 1996) : « Etude de l'interaction fluides de puits - fluides de gisement »

J. Naiglin (DEA, 1997) : « Le lessivage des huiles de gisement à haute pression et haute température »

I. Fondio (DEA, 1998) : « Prédiction de la viscosité des fractions lourdes à haute température en présence d'hydrogène dissous »

S. Shakir (Master of Engineering, DTU, 2000): " Prediction of the water-washing phenomenon"

S. Tamouza (DEA, 2001): " Modélisation d'équilibres de phases d'hydrocarbures purs par l'équation SAFT"

T.X. Nguyen Thi (DEA, 2002): "Application de l'équation d'état SAFT à la prédiction des tensions de vapeur et des volumes molaires des esters lourds utilisés dans les fluides de forage"

A. Levy (Ingénieur, U. S Bolivar, 2001): " Validation d'une bibliothèque thermodynamique orientée objet, SPIP"

T.N. Nguyen Thi (DEA 2003): " Mise en place d'une équation d'état basée sur une cubique et un terme dipôle - dipôle"

A. Levy (DEA 2003): "Conception et Validation d'un Outil de simulation pédagogique pour l'enseignement de la thermodynamique"

R. Inchekel (DEA 2004): "Application de l'équation d'état CPA aux systèmes eau - hydrocarbures"

G. Buret (Ingénieur, 2008): "Amélioration des performances de l'équation d'état SAFT"

H Bui (Master Recherche 2013) : « Utilisation d'une équation d'état issu de la thermodynamique statistique pour décrire des alcanes ramifiés »

### 3. PUBLICATIONS

#### **Rédaction d'ouvrage :**

de Hemptinne J.C., Ledanois, J-M, Mougin, P; Barreau, A.: " How to select a thermodynamic model for process simulation: Problem analysis in three steps", Editions Technip, 2012 (ISBN 2710809494)

#### **Rapports IFP:**

de Hemptinne J.C., Ungerer P.: "**HP-HT Characterization of reservoir fluids**" *Rapport IFP* n° 40601, 1993

de Hemptinne, J-C : "**ARTEP project: properties of water-hydrocarbon systems**" IFP ref 41177 (1994a)

de Hemptinne, J.C. : "**Comparaison de différents modèles de calcul pour la solubilité des gaz (CH<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S) dans l'eau en présence de sels**"; janvier; 1994; *Rapport IFP* n° 41439;

Berton, N., Brunella, I., de Hemptinne, J.C. : "**Mesure de la solubilité réciproque de l'eau et des hydrocarbures à haute pression et haute température**"; décembre; 1994; *Rapport IFP* n° 41824;

Brunella, I., de Hemptinne, J.C. Moracchini, G.: "**Analyse du fluide Elgin en présence d'eau**"; Janvier; 1995; *Rapport IFP* n° 42005;

Behar, E., Behar, F., de Hemptinne, J.C. Werner, A.: "**Influence of thermodynamic properties of fluids generated in source rocks on petroleum migration**"; Décembre 1995; *Rapport IFP* n° 42573;

Brunella, I., de Hemptinne, J.C. Moracchini, G. Zhou, H.: "**Influence of water on the estimate of gas in place**"; Janvier; 1997; *Rapport IFP* n° 42884;

de Hemptinne, J.C. "**Etude de modèles permettant de décrire la saturation en eau d'un gaz**"; Janvier; 1997; *Rapport IFP* n° 43594;

de Hemptinne, J.C. Dhima, A., Moracchini, G.: "**Solubilité des hydrocarbures légers et de leurs mélanges dans de l'eau pure à haute pression**"; Janvier; 1997; *Rapport IFP* n° 43669;

de Hemptinne, J.C. Delepine, H., Jose, J.; "**A thermodynamic approach for predicting water solubility of hydrocarbon mixtures**"; Janvier; 1997; *Rapport IFP* n° 43866;

de Hemptinne, J.C. & Behar, E.; "**Propriétés thermodynamiques de systèmes contenant des gaz acides**"; Mars; 1998; *Rapport IFP* n° 44427;

Carpentier, B., de Hemptinne, J-C, Gheheneux, G., Huc, A-Y, Kowalewski, I., Lafargue, E., Magnier, C., Mougin, P., Naiglin, J., Ungerer, P.: "**Hétérogénéités de composition des hydrocarbures dans les gisements (FSH 1995-1997, Coprep G1101/95)**" *Rapport IFP* n°44476 janvier 1998 ,

Brunella, I., de Hemptinne, J-C, Dhima, A., Gaillard, K., Zhou, H.: "**Etude de l'influence de l'eau sur des mesures de point de rosée**" *Rapport IFP* n°44915 novembre 1998 ,

Benjelloun-Dabaghi, Z., Dal Maso, F. de Hemptinne, J-C, Défontaines, A.D, Flaconnèche, B., Martin, J.: "**Perméabilité dans les polymères**" *Rapport IFP* n°45041 novembre 1998 ,

Peumery, R. Ruffier-Meray, V., Moracchini, G. & de Hemptinne, J-C : "**Etude compositionnelle du lessivage par l'eau d'un fluide de gisement**" 1998 , *Rapport IFP* n°45048

Ambrosino, J-L, de Hemptinne, J-C : "**Définition d'un modèle thermodynamique pour le procédé isopure**" *Rapport IFP* n° 45234 de janvier 1999.

de Hemptinne, J-C & Huyghe, R. : "**Séparation des alpha-oléfines: choix du modèle thermodynamique**" *Rapport IFP* n° 45379 de février 1999.

de Hemptinne, J-C & Leroy, J-M. : "**MOLDI: principe du module thermodynamique**" *Rapport IFP* n° 45758 de septembre 1999.

de Hemptinne, J-C , Defiolle, D., Moracchini, G.: "**Etude des systèmes méthane/ester dans des conditions hautes pression – hautes températures**" *Rapport IFP* n° 52689 de décembre 1999.

Brunella, I., de Hemptinne, J-C & Duriez, G.: "**Echantillonneur C1-C8 (P1304/98)**" *Rapport IFP* n° 52692 de septembre 1999.

de Hemptinne J-C, Emond F, Vacher P. : « **Documentation de référence des modèles thermodynamiques disponibles dans SPIP (version 1.0).** » Rapport n° 52818 de novembre 1999

Courcy, J-P, de Hemptinne, J-C & Huyghe, R. : "**Prédiction des densités et des viscosités des charges des tamis Elupar**" Rapport IFP n° 52914 de décembre 1999.

de Hemptinne, J-C, Dordain, L., Duchet-Suchaux, P., Rauzy, E., Ye, S., Zhou, H. : "**Propriétés des systèmes eau-hydrocarbures**" Rapport IFP n° 52982 de janvier 2000.

de Hemptinne, J-C & Huyghe, R. : "**Méthode de regroupement pour les calculs d'équilibre liquide-vapeur dans les conditions du réacteur Fischer-Tropsch**" Rapport IFP n° 54077 de janvier 2000.

de Hemptinne J-C, Duchet-Suchaux P., Zhou H., Rauzy E., Ye S., Dordain L. : « **Propriétés des systèmes eau-hydrocarbures, Synthèse du projet ARTEP** » Rapport n° 52982 de janvier 2000

de Hemptinne, J-C & Panayiotou, C. : « **Solubility of gases in semi-crystalline polymers** » Rapport IFP n° 55605 de novembre 2000.

Behar, E., de Hemptinne, J-C Dordain, L, Duchet-Suchaux, P., Durandea, M., Faissat, B., Montel, F., Ruffier-Meray, V., Ungerer, P., Zhou, H. : « **Thermodynamique des fluides de gisements et des effluents de production: FSH 1992-1998, Coprep G0302** » Rapport IFP n° 54079 de mai 2000.

de Hemptinne, J-C & Panayiotou, C. : « **Solubility of gases in semi-crystalline polymers** » Rapport IFP n° 55605 de novembre 2000.

Benjelloun-Dabaghi Z., de Hemptinne, J-C, Leroy, J-M, Perez, S. : « **Etat thermodynamique des fluides dans les conduites flexibles** » Rapport IFP n° 55670 de décembre 2000.

de Hemptinne, J-C & Huyghe, R. : « **P-Xylene crystallisation** » Rapport IFP n° 55781 de janvier 2001.

de Hemptinne, J-C, Jussaume, L. : « **Etat des lieux des modèles utilisés pour l'estimation des propriétés physicochimiques des phases liquide et vapeur d'un résidu pétrolier: procédé HYVAHL** », Rapport IFP n°55924, mars 2001,

de Hemptinne, J-C, Galtier, P. : « **Journée "Estimation de paramètres" des clubs thermodynamique et Cinétique de la direction scientifique** », Rapport IFP n°56285, septembre 2001,

de Hemptinne, J-C, Flaconnèche, B.; Lachet, V. : « **Propriétés d'équilibre de polymères semi-cristallins: compilation des mesures PVT et des données de solubilité** », Rapport IFP n°56401, Novembre 2001,

de Hemptinne, J-C, Portannier, B. : « **Constantes de Henry pour la description du stripping des VOC d'eaux usées** », Rapport IFP n°56455, Novembre 2001,

de Hemptinne, J-C, Nichita, D.V. : « **Isochoric Phase Stability and flash calculations** », Rapport IFP n°56978, Aout 2002,

Nichita, D.V., Broseta, D., de Hemptinne, J-C : « **Efficient Phase Equilibrium Calculation for Compositional Simulation** », 2002, Rapport IFP n°57111

de Hemptinne, J-C & Huyghe, R., Rasmussen, P., Thomsen, K. : « **P-Xylene crystallisation in a C8 aromatics cut** » Rapport IFP n° 7272 de Janvier 2003.

de Hemptinne, J-C: "**Etude du risque de cristallisation lors de la liquéfaction du gaz naturel**", mars 2004, rapport IFP 58224

de Hemptinne, J-C: "**Calcul de flash isochore pour MOLDI<sup>(R)</sup>**", mars 2005, rapport IFP 58581

de Hemptinne, J-C: "**Tests du prototype d'un serveur thermodynamique**", rapport IFP 58488, janvier 2005,

de Hemptinne, J-C, Inchekel, R.; Mougin, P., Ruffine, L. : "**Programmation de l'équation CPA (Cubic Plus Association) dans la BOC (Bibliothèque d'Outils Commun)**" Rapport 58644 – Avril 2005

de Hemptinne, J-C, Tamouza, S: "**Utilisation de l'équation d'état SAFT; Programmation et résultats par contribution de groupes**" Rapport 59264 – Juin 2006

de Hemptinne, J-C, Gherbi, H., Passarello, J-P: "**Application de l'équation d'état SAFT combinée avec des contributions de groupe aux équilibres liquide-liquide alcane-alcool**" Rapport 59661 – Février 2007

Benamira, A., de Hemptinne, J-C, Passarello, J-P: "**Application de l'équation d'état SAFT combinée avec une méthode de contribution de groupes aux hydrocarbures aromatiques**" Rapport 59095 – Février 2006

Lin Y., de Hemptinne, J-C: "**Equation of state of electrolyte solutions: use of the mean spherical approximation**" Rapport 59232 – Mars 2006

de Hemptinne, J-C: "**Utilisation de l'équation d'état SAFT: Programmation et résultats par contribution de groupes**" Rapport 59264 – Mai 2006

Boyedjian Y., de Hemptinne, J-C, Ferrando Nicolas, Roux Pascal: "**Manuel d'utilisateur/développeur de Carnot V1**", Rapport IFP 59844, Mai 2007

de Hemptinne, J-C, Gherbi H., Passarello J.-P. : « **Application de l'équation d'état SAFT combinée avec des contributions de groupes aux équilibres liquide-liquide alcane+alcool.** », rapport IFP 59661, Mai 2007



- de Hemptinne, J-C, Ferrando Nicolas, Passarello J.P.°, Tobaly P.°, Tran Thi Kim Siem : "**Application de l'équation SAFT aux mélanges hydrogène / hydrocarbures.**" Rapport IFP 60492; Juillet 2007
- Buret G., De Hemptinne Jean-Charles : "**Équations d'état SAFT : amélioration des performances.**" Rapport IFP 60489, Juin 2008
- de Hemptinne, J-C, Ferrando Nicolas, Normand Laurent, Pina Annabelle : "**Cahier de tests pour CARNOT V2 : cahier de réception.**" Rapport IFP 60448, Juin 2008
- Andreatta A.°, Bottini S.°, Brignole E. A.°, de Hemptinne, J-C, Ferreira O.°, Garrido N.°, Lugo Rafael, Macedo E. A.°, Pereda S : "**Modelling phase equilibria of systems of interest in bio-refineries using two group-contribution models with association.**" Rapport IFP 60270, Mars 2008
- Duchene, P. ; de Hemptinne, J-C, Mougin, P. : "**Calcul de flash liquide-vapeur (T,P) par minimisation d'une fonction proche de l'enthalpie libre .** « , rapport IFP 60969, Février 2009
- de Hemptinne, J-C, Lugo, R. NguyenHuynh, D. : "**Mise à jour du code de calcul GC-PC-SAFT-polaire (GC-PPC-SAFT) : modélisation des équilibres liquide-liquide et liquide-vapeur de mélanges contenant des molécules oxygénées multifonctionnelles** ». , rapport IFP 61097, Septembre 2009
- de Hemptinne, J-C, Lefebvre, C. ; Lugo, R. : "**Description des carburants moteurs à l'aide du code Ref Gen.**" , rapport IFP 61021, Juillet 2009
- de Hemptinne, J-C, di Lella, A. : "**Cahier de tests pour CARNOT V4 - Cahier de réception** » , rapport IFP 61034, Aout 2009

## **Brevets IFP**

- de Hemptinne J.C., Barreau A., Ungerer P., Moracchini G., Sanchez J.: "Dispositif perfectionné de séparation des phases d'un échantillon fluide" *IFP Patent* n° 94/08 259 - *Rapport IFP* n° 41507, 1994
- Moracchini, G; J. Sanchez, J-C de Hemptinne & P. Ungerer: "Dispositif pour faire des mesures thermodynamiques sur des fluides polyphasiques à très hautes pressions et températures" *IFP Patent*; report n° 41739; National registration n° 94/10 784 1994
- Duriez, G. ; Le Cann, J-P & de Hemptinne, J-C : « Méthode et système d'extraction, d'analyse et de mesure sur des constituants transportés par un fluide de forage » IFP Patent, Réf PJN 0003 (1999)

## **Sélection des participations à congrès internationaux**

- de Hemptinne, J-C, Barreau, A., Ungerer, P. & Behar, E.; Evaluation of Equations of State at High Pressure for Light Hydrocarbons; ; 1998; 53-70; Thermodynamic Modeling and Materials Data Engineering; Springer-Verlag, Berlin, Caliste et al., Editors; (Proceedings of the 14th International Codata Conference; 18-22 September, 1994)
- de Hemptinne, J-C, Zhou, H., Moracchini, G. and Brunella, I : « Influence of Water on the estimate of Gas In Place » 1996; *SPE*; 36669; SPE, Annual Technical Conference and Exhibition, Denver, CO, Oct 6-9.;
- de Hemptinne, J-C, A. Dhima & H. Zhou : « New challenges resulting from Water-Hydrocarbon phase Equilibria for Reservoir Production and Drilling Operations » Mai-Juin; 1998; *Revue de l'IFP*; **53**; 3; 283-302 (presented at the High Pressure-High temperature seminar, IFP, december 1997)
- de Hemptinne, J-C, A. Dhima, J. Naiglin : « Reassessment of the synergetic effect for hydrocarbon solubility in water », Eighth International Conference on Properties and Phase Equilibria for Product and process Design, Noordwijkerhout (NL), April 26 – May 1, 1998
- de Hemptinne, J-C, A. Aubertin-Couvreur, I. Fondio, D. Broseta : « Viscosity prediction of heavy crudes in hydrotreatment conditions » *AIChE Spring meeting* / March 14-18, 1999 / Houston, Texas Heavy Oils and Asphaltene II session
- de Hemptinne, J-C ; Dhima, A. ; Shakir, S.: "The Henry constant for 20 hydrocarbons, CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S in water as a function of pressure and temperature » Paper presented at the Fourteenth symposium on Thermophysical Properties, June 25 – 30, 2000, Boulder, Colorado, USA

Bureau, N., de Hemptinne, J-C, Audibert, A, Herzhaft, B: "Interactions between Drilling Fluids and Reservoir Fluids" ,2002, Conference Proceedings, *SPE 77475*, SPE ATCE, San Antonio, Tx, 29 September- 2 October 2002

Nichita, D.V., de Hemptinne, J.C., Gomez, S: "Isochoric Phase Stability Analysis and Flash Calculation" ,2002, Conference Proceedings, AIChE Spring Meeting, New Orleans, LA, March 10-14 2002

de Hemptinne, J-C: "Benzene Crystallisation Risks in LNG processes", AIChE Spring meeting, 2005

Chi, L.T., Tamouza, S., Tobaly, P., Passarello, J-P, de Hemptinne, J-C: "Modelling phase equilibrium of H<sub>2</sub>+hydrocarbon binary mixtures using GC-SAFT equation of state with a kij group contribution method", 21<sup>st</sup> European Seminar on Applied Thermodynamics (ESAT), June 2005, Jurata, Poland

Falaix, A.; Pasarello, J-P; Tobaly, P.; de Hemptinne, J-C: "Predicting VLE of esters containing systems using a groupe contribution SAFT EOS (GC-SAFT), 22<sup>nd</sup> European Seminar on Applied Thermodynamics (ESAT), July 2006, Elsinore, DK

Nguyen Huynh, D.; Benamira, M.; Pasarello, J-P; Tobaly, P.; de Hemptinne, J-C: "Application of GC-SAFT EOS to Polycyclic Aromatic Hydrocarbons " ThermoInternational, Boulder, CO August 2006

Inchekel, R.; de Hemptinne, J-C, Fürst, W.: "Extension of the CPA equation of state for electrolyte applications" ESAT, May 2008, Cannes, F

Nguyen Huynh, D., Passarello, J-P, Tobaly, P., de Hemptinne, J-C: "GC-SAFT as a predictive tool for computing VLE and LLE of systems involved in oil and gas industry" ESAT, May 2008, Cannes, F

Mourah, M., de Hemptinne, J-C, Passarello, J-P, Tobaly, P. : "Modelling VLE and LLE of water + n-alkane systems using GC-PC-SAFT eos" ESAT, May 2008, Cannes, F

Tran, T.K.S., NguyenHunh, D., Ferrando, N., Passarello, J-P, Tobaly, P, de Hemptinne, J-C, : "Modeling VLE of H<sub>2</sub>+hydrocarbon mixtures using a Group contribution SAFT with a kij correlation based on London's theory" ESAT, May 2008, Cannes, F

de Hemptinne, J-CTran, T.K.S., NguyenHunh, D., Ferrando, N., Passarello, J-P, Tobaly, P. : "Predictive models and their need in the biofuel industry" Invited presentation at the 9<sup>th</sup> EQUIFASE meeting; Praia da Rocha (Portugal); October 2009

Thermodynamics 2011  
SAFT 2011

### ***Journaux avec relecture:***

de Hemptinne, J; P. Ungerer : “ Accuracy of the volumetric predictions of some important equations of state, including a modified version of the Lee & Kesler method ” 1995, *Fluid Phase Eq. N° 106*, pp 81-109

Werner A., Behar F., de Hemptinne J. C., Behar E. : “ Thermodynamic properties of petroleum fluids during expulsion and migration from source rocks ” 1996, *Org. Geochem. 24*; 10/11; pp 1079-1095

de Hemptinne, J-C, Zhou, H., Moracchini, G. and Brunella, I : “ Influence of Water on the estimate of Gas In Place ” 1997; *SPE Reservoir Engineering*; 12, p<sub>3</sub>

Dhima, A.; J-C de Hemptinne & G. Moracchini : “ Solubility of light hydrocarbons and their mixtures in pure water under high pressure ” 1998; *Fluid Phase Eq.*; 145; pp129-150

Dhima, A.; J-C de Hemptinne & Jose, J. : « Solubility of Hydrocarbons in water under high pressure », 1999, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 38, pp3144-3161

Marteau, P., Tobaly, P., Ruffier-Meray, V. & de Hemptinne, J-C: "High Pressure phase diagrams of methane + squalane and methane + hexatriacontane mixtures" (1998) *J. Chem Eng Data*, vol 43, n°3 pp 362-366

Werner, A., Behar, F., de Hemptinne, J-C & Behar, E. : “ Viscosity and phase behaviour of Petroleum fluids with high Asphaltene contents ” 1998; *Fluid Phase Equilibria*; 147; pp 343-356

Werner, A., de Hemptinne, J-C, Behar, F., Behar, E., Boned, C. : « A new viscosity model for petroleum fluids with high asphaltenes content » 1998; *Fluid Phase Equilibria*; 147; pp 319-341

de Sant’Ana, H.B., Ungerer, P. & de Hemptinne, J-C: “ Evaluation of an improved volume translation for the prediction of hydrocarbon volumetric properties ” 1999; *Fluid Phase Equilibria* , 154, pp 193-204

Berthezene, N., de Hemptinne J-C, Audibert, A., Argillier, J-F: « Methane Solubility in Synthetic Oil Based Drilling Muds » , 1999, *J. Pet. Sci Eng.* , Vol 23, n°9, pp71-81

- de Hemptinne, J-C, Peumery, R., Ruffier-Meray, V., Moracchini, G., Niaglin, J. : « Compositional changes resulting from the water-washing of a petroleum fluid », 2000, *J. Pet. Sci. Tech.*, accepted for publication
- Bureau, N; Jose, J.; Mokbel, I & de Hemptinne, J-C : « Vapour pressure measurements and predictions for heavy esters », *J. Chem. Thermodynamics*, 2001, **33**, pp1-14
- Bureau, N., Defiolle, D. & de Hemptinne, J-C : « Phase Equilibria of (methane - long chain ester cuts) systems in drilling conditions » *Fluid Phase Eq.*, 2002 **194-197**, pp 831-846
- Tamouza, S; Passarello, J-P; Tobaly, P. & de Hemptinne, J-C: " Group contribution method with SAFT EOS applied to vapor liquid equilibria of various hydrocarbon series" *Fluid Phase Equilibria*, 2004, **222- 223** pp 67-76
- Tamouza S., Passarello J.P., Tobaly P., de Hemptinne J.C., 2005, "Application to binary mixtures of a group contribution SAFT EOS (GC-SAFT)", *Fluid Phase Eq.*, 228-229, 409
- Marche, C., Ferronato, C., de Hemptinne, J-C, Jose, J., 2005: "Apparatus for the determination of water solubility in hydrocarbons: Toluene and alkylCyclohexanes (C6-C8) from 30°C to 180°C" *J. Chem. Eng. Data*, Vol 51 (2), p 355-359
- T.X. Nguyen Thi, Tamouza S., Passarello J.P., Tobaly P., de Hemptinne J.C., 2005, "Application of Group Contribution SAFT equation of state (GC-SAFT) to model phase behaviour of light and heavy esters", *Fluid Phase Eq.*, 238,254-261
- de Hemptinne, J-C, 2005: "Benzene Crystallization Risks in the LIQUEFIN Liquefied Natural Gas Process, *Process Safety Progress*, vol 24, n°3, p 203-211
- de Hemptinne, J-C, Mougine, P.; Barreau A.; Ruffine, L., Tamouza S., Inchekel, R., 2006: "Application to petroleum engineering of statistical thermodynamics – based equations of state" *OGST*, Vol 61, n°3 p345-361
- de Hemptinne, J-C, Behar, E.: "Thermodynamic Modelling of Petroleum Fluids", 2006: *OGST*, Vol 61, n°3 p303-317
- Chi, L.T., Tamouza, S., Passarello, J-P, Tobaly, P., de Hemptinne, J-C, 2006: "Modeling Phase Equilibrium of H2 + n-Alkane and CO2 + n-Alkane Binary Mixtures Using a Group Contribution Statistical Association Fluid Theory Equation of State (GC-SAFT-EOS) with a kij Group Contribution Method" *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol 45, p6803-6810
- Nichita, D.V.; Broseta, D., de Hemptinne, J-C, 2006: "Multiphase Equilibrium Calculation Using Reduced Variables" *Fluid Phase Eq.*, Vol 246, p 15-27
- Lin, Y; Thomson, K.; de Hemptinne, J-C, 2007: "Multicomponent Equations of state for electrolytes", *AIChE J*; vol 53, N°4, p 989-1005
- Nguyen Huynh, D.; Benamira, M.; Passarello, J-P; Tobaly, P., de Hemptinne, J-C, 2007: "Application of GC-SAFT EOS to polycyclic aromatic hydrocarbons" *Fluid Phase Equilibria*; vol 254, p 60-66
- Shakir, S., de Hemptinne, J-C, 2007: "The effect of diffusion on the modelling of the water-washing phenomenon" *J.Pet. Sci. Eng.*; vol 58, p 403-412
- Nguyen Huynh, D.; Passarello, J-P; Tobaly, P., de Hemptinne, J-C, 2008: "Application of GC-SAFT EOS to polar systems using a segment approach" *Fluid Phase Equilibria*; vol 264, p 62-75
- Nguyen Huynh, D.; Passarello, J-P; Tobaly, P., de Hemptinne, J-C, 2008: "Prediction of heavy esters and their mixtures using GC-SAFT" *Fluid Phase Equilibria*; vol 264, p 184-200
- Inchekel, R., de Hemptinne, J-C, Fürst, W., 2008: "The simultaneous representation of dielectric constant, volume and activity coefficients using an electrolyte equation of state", *Fluid Phase Equilibria*; vol 271, p 19-27
- Nguyen Huynh, D.; Passarello, J-P; Tobaly, P., de Hemptinne, J-C, 2008: " Modeling Phase Equilibria of Asymmetric Mixtures Using a Group-Contribution SAFT (GC-SAFT) with a kij Correlation Method Based on London's Theory. 1. Application to CO2 + n-Alkane, Methane + n-Alkane, and Ethane + n-Alkane Systems" *Industrial Engineering & Chemistry Research*; vol 47, p 8847-8858
- Nguyen Huynh, D.; Tran, T.K.S.; Tamouza, S.;Passarello, J-P; Tobaly, P., de Hemptinne, J-C, 2008: " Modeling Phase Equilibria of Asymmetric Mixtures Using a Group-Contribution SAFT (GC-SAFT) with a kij Correlation Method Based on London's Theory. 2. Application to Binary Mixtures Containing Aromatic Hydrocarbons, n-Alkanes, CO2, N2, and H2S" *Industrial Engineering & Chemistry Research*; vol 47, p 8859-8868
- Zabala, D; Nieto-Draghi, C.; de Hemptinne, J-C; Lopez de Ramon, A., 2008: "Diffusion Coefficients in CO2/n-Alkane Binary Liquid Mixtures by Molecular Simulation" *J. Phys. Chem. B*, Vol 112 (51), pp 16610–16618

- Tran, T.K.S.; NguyenHuynh, D.; Ferrando, N.; Passarello, J-P; de Hemptinne, J-C; Tobaly, P.: "Modeling VLE of H<sub>2</sub>+HC mixtures using a group-contribution SAFT with a kij correlation method based on London's theory" *Energy & Fuels*, 2009, Vol 23 p 2658-2665
- Nichita, D.V.; de Hemptinne, J-C; Gomez, S.: "Isochoric Phase Stability Testing for hydrocarbon mixtures" *Petroleum Science & Technology*, 2009, Vol 27, N°18, p 2177-2191
- Andreatta, A. E.; Lugo, R.; de Hemptinne, J. C.; Brignole, E. A.; Bottini, S. B. Phase equilibria modeling of biodiesel related mixtures using the GCA-EoS model. *Fluid Phase Equilibria* 2010, 296 (2), 75-81
- Barreau, A.; Brunella, I.; de Hemptinne, J. C.; Coupard, V.; Canet, X.; Rivollet, F. Measurements of Liquid-Liquid Equilibria for a Methanol + Glycerol + Methyl Oleate System and Prediction Using Group Contribution Statistical Associating Fluid Theory. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2010, 49 (12), 5800-5807.
- Mourah, M.; NguyenHuynh, D.; Passarello, J. P.; de Hemptinne, J. C.; Tobaly, P. Modelling LLE and VLE of methanol+ $\alpha$ n-alkane series using GC-PC-SAFT with a group contribution kij. *Fluid Phase Equilibria* 2010, 298 (1), 154-168.
- Hendriks, E., Kontogeorgis, G., Dohrn, R., de Hemptinne, J-C, Economou, I., Fele Zilnik, L., Vesovic, V: Industrial requirements for thermodynamics and transport properties, *I&EC Research* , 2010, vol 49, pp 11131-11141
- Rozmus, J.; de Hemptinne, J-C; Mougin, P.; Application of GC-PPC-SAFT EoS to amine mixtures with a predictive approach, *Fluid Phase Equilibria*, 2011, vol 303, p 15-30
- NguyenHuynh, D., de Hemptinne, J-C; Lugo, R. ; Passarello, J.P.; Tobaly, P.: Modeling Liquid-Liquid and Liquid-Vapor Equilibria of Binary Systems Containing Water with an Alkane, an Aromatic Hydrocarbon, an Alcohol or a Gas (Methane, Ethane, CO<sub>2</sub> or H<sub>2</sub>S), Using Group Contribution Polar Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory, *I&EC Research* , 2011, vol 50, n°12, pp 7467-7483
- NguyenHuynh, D. ; Passarello, J.P; de Hemptinne, J-C; Tobaly, P.: Extension of GC-SAFT to systems containing some oxygenated components: application to ethers, aldehydes and ketones, *Fluid Phase Equilibria*, 2011, vol 307, n°2, pp 142-159
- Ferrando, N.; de Hemptinne, J-C, Mougin, P., Passarello, J-P: Prediction of the PC-SAFT Associating Parameters by Molecular Simulation, *J. Phys. Chem. B*, 2012, vol 116, pp 3239-3248
- Rozmus, J., de Hemptinne, J-C; Mougin, P: "Long Chain Multifunctional Molecules with GC-PPC-SAFT" *Fluid Phase Equilibria*, 2012

## 4. Mon Projet Professionnel: *Transmission des nouveaux acquis de la recherche*

Mon projet professionnel se base sur ma conviction que sans innovation l'industrie ne pourra pas répondre aux grands défis qui se pose à elle dans notre époque: le développement durable. L'innovation passe, entre autre par la recherche, et l'IFPEN a un rôle très fort dans ce sens: construire l'industrie de l'avenir par la recherche et par la formation professionnelle, en particulier en collaborant à la transition énergétique dont la nécessité est reconnue par tous aujourd'hui. Mon projet veut y contribuer, en utilisant au mieux mes compétences et connaissances. Concrètement, je désire construire ce projet autour des trois axes suivants, en ordre de priorité :

- **Recherche:** c'est ma compétence de base qui doit être orienté vers les besoins à long terme de l'industrie. Ainsi, en thermodynamique, je me suis engagé depuis dix ans à développer des équations d'état basés sur des concepts moléculaires afin d'offrir des modèles prédictifs de propriété de phases fluides, directement utilisables par l'industrie. Ce développement doit de plus en plus se fonder sur des concepts de mécanique statistique, et faire appel à des outils complémentaires tels la simulation moléculaire ou *ab initio*. Ce travail doit se faire dans le cadre d'un réseau que je désire renforcer, entre universitaires et IFP (spécialistes en mécanique statistique, électrolytes, méthodes moléculaires, ...).
- **Développement:** Les travaux de recherche doivent pouvoir déboucher dans le cadre d'applications concrètes. Ceci pourra se faire par le développement d'outils conviviaux utilisables par des non-spécialistes. C'est l'objectif premier du code de calcul CARNOT que nous développons dans le département Thermodynamique. Par ailleurs, la collaboration avec des petites entreprises, comme ProSim, qui ont un marché dans le domaine de la simulation de procédé doit être encouragée.
- **Transmission:** La transmission des acquis de la recherche se fait non seulement par des outils, mais également par la formation. Comme professeur IFP-School, je suis ainsi très sensible à la pédagogie liée à cette transmission aux différents niveaux:
  - au niveau des masters professionnels, où je désire m'assurer que les enseignements correspondent aux besoins exprimés par les professionnels,
  - au niveau des masters recherche, car je pense qu'il est essentiel que des jeunes soient sensibilisés au développement des nouvelles technologies par la recherche, permettant ainsi de fournir des experts avec une formation pointue, capable de raisonner et de proposer des innovations pertinentes
  - au niveau de la formation permanente, car les technologies évoluent très vite, et il est important que quiconque, qui par sa mobilité professionnelle doit entrer en contact avec les nouvelles technologies, soit le plus rapidement possible à niveau pour participer activement à la prise de décision.C'est pour répondre à ces objectifs que j'ai rédigé l'ouvrage « How to Select Thermodynamic Models for Process Simulation » qui doit servir aux professionnels, non spécialistes en thermodynamique, à construire un raisonnement sain autour de leur problème spécifique en vue de répondre au mieux à leur besoin de modèle.

Ces différentes actions se couplent à une volonté de participer activement aux développements réseaux de connaissance et de transmission par le biais des sociétés savantes ou de congrès et séminaires. Je suis ainsi représentant de la Société Française du Génie des Procédés (SFGP) au sein de la 'European Federation of Chemical Engineers' (EFCE), et, dans ce cadre, j'ai lancé un groupe de travail "Thermodynamique" au sein de la SFGP, que j'anime.