

## **Modélisation cinétique de la transestérification du glycérol en présence de catalyseurs de sélectivité variable**

### **Kinetic modelling of glycerol transesterification over catalysts of variable selectivity**

Oléagineux, Corps Gras, Lipides. Volume 9, Numéro 2, 163-8, Mars - Juin 2002, Fondamental

**Auteur(s)** : Sébastien BANCQUART, Yannick POUILLOUX, Joël BARRAULT, Laboratoire de catalyse en chimie organique, UMR CNRS 6503, ESIP, 40, avenue du Recteur-Pineau, 86022 Poitiers, France.

**Author(s)** : Sébastien BANCQUART, Yannick POUILLOUX, Joël BARRAULT

**Résumé** : Une modélisation cinétique de la réaction de transestérification du glycérol par des esters méthyliques en présence de catalyseurs plus ou moins sélectifs a été effectuée. Le modèle montre que la sélectivité du catalyseur peut être clairement identifiée moyennant seulement une expérience et sans aucun calcul supplémentaire. Cette modélisation peut donc être d'un grand intérêt pour l'optimisation de catalyseurs spécifiques dans la réaction choisie.

**Summary** : A kinetic modelling of the glycerol transesterification with methyl esters over catalysts of variable selectivity was proposed. The results of this study showed that the selectivity of a given catalyst could be estimated from a single experiment without further calculation. Such a method seemed very useful for the catalyst optimization, which is now under investigation.

**Mots-clés** : glycérol, transestérification, méthylesters, modélisation cinétique.

**Keywords** : glycerol, transesterification, methylesters, kinetic modelling.

#### ARTICLE

La réaction de transestérification du glycérol est une réaction complexe. En effet, la possibilité d'existence de trois réactions successives, de réactions d'interestérification (ainsi, la réaction de deux diesters conduisant à un monoester et à un triester) ainsi que l'existence de réactions secondaires (telle la formation de polyglycérols) rendent le comportement cinétique de nos composés difficile à prévoir de manière instinctive. Une modélisation cinétique a donc été nécessaire.

Notons que cette modélisation n'a pas pour objectif de calculer les constantes réelles de la réaction, mais de valider un modèle théorique ainsi que d'exploiter ce modèle afin d'aider à prévoir la réactivité de notre milieu. Tous les paramètres, notamment les constantes de vitesse et les temps, sont donnés en unités arbitraires.

#### **Modélisation**

Le modèle représenté à la *figure 1* peut être envisagé pour décrire la réaction étudiée. Dans le cas de réactions avec des esters méthyliques d'alcools de longueur de chaîne carbonée supérieure à 12, la

solution initiale est biphasée. Dans la *figure 1*, la phase glycérol est représentée en jaune tandis que la phase ester méthylique est représentée en grisé. Les composés volatils (eau et méthanol) sont laissés en noir.

Industriellement, la réaction peut être effectuée en présence de divers catalyseurs (acides ou bases, homogènes ou hétérogènes), à des températures de l'ordre de 200 °C. Dans certaines conditions expérimentales, la formation de polyglycérols peut être négligeable. Nous pouvons donc éliminer du modèle toutes les réactions conduisant à ces composés. De plus, nous pouvons simplifier grandement le problème en ne tenant pas compte des isoméries de position et des isoméries optiques. Nous simplifions de plus le modèle en moyennant les vitesses de formation des composés en position 1 et 2 afin d'obtenir la vitesse globale de formation. Enfin, nous pouvons inclure dans les constantes de réaction les constantes de transfert de phase, ce qui élimine la composante multiphasée. Ainsi, par exemple, la réaction glycérol + ester méthylique fait normalement intervenir deux constantes de réaction en phase aqueuse, deux constantes de réaction en phase organique, deux constantes de réaction à l'interface, les concentrations de réactifs et de produits dans les deux phases ainsi que des constantes de diffusion entre les deux phases, liées aux coefficients de partage [1]. Notre simplification du modèle ramène tout ceci à deux constantes de réaction et à des concentrations globales.

Soient les conventions suivantes :

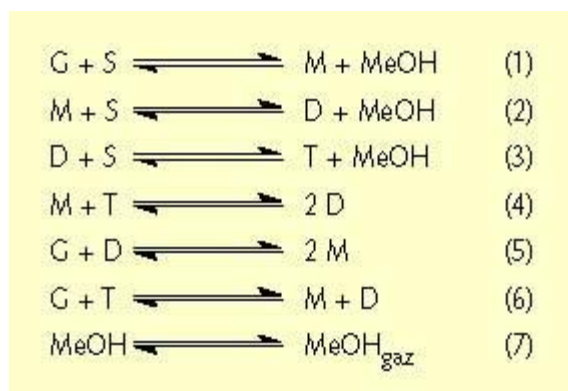
G : concentration en glycérol,

M, D, T : concentrations en mono, di- et triesters de glycérol,

MeOH : concentration en méthanol dissous,

S : concentration en ester méthylique (stéarate).

Du schéma réactionnel précédemment établi, on peut tirer le modèle cinétique décrit par l'*équation 1*.



Équation 1. *Modèle de réaction simplifié.*

Nous considérerons que toutes ces réactions chimiques sont d'ordre 1 par rapport à chaque réactif,

ce qui revient à négliger dans une première étape les problèmes de diffusion. Cela nous mène donc au système d'équations de l'équation 2,

$$\begin{aligned} \frac{d[G]}{dt} &= -k_4 \cdot [G] \cdot [S] + k_1 [M] \cdot [MeOH] - k_5 \cdot [G] \cdot [D] + k_5 [M]^2 - k_6 \cdot [G] \cdot [T] + k_6 \cdot [M] \cdot [D] \\ \frac{d[M]}{dt} &= k_4 \cdot [G] \cdot [S] - k_1 [M] \cdot [MeOH] - k_2 \cdot [M] \cdot [S] + k_3 \cdot [D] \cdot [MeOH] - k_4 \cdot [M] \cdot [T] \\ &\quad + k_4 \cdot [D]^2 + 2k_5 \cdot [G] \cdot [D] - 2k_5 \cdot [M]^2 + k_6 \cdot [G] \cdot [T] - k_6 \cdot [M] \cdot [D] \\ \frac{d[D]}{dt} &= k_2 \cdot [M] \cdot [S] - k_2 \cdot [D] \cdot [MeOH] - k_3 \cdot [D] \cdot [S] + k_3 \cdot [T] \cdot [MeOH] + 2k_4 \cdot [M] \cdot [T] \\ &\quad - 2k_4 \cdot [D]^2 - k_5 \cdot [G] \cdot [D] + k_5 \cdot [M]^2 + k_6 \cdot [G] \cdot [T] - k_6 \cdot [M] \cdot [D] \\ \frac{d[T]}{dt} &= k_3 \cdot [D] \cdot [S] - k_3 \cdot [T] \cdot [MeOH] - k_4 \cdot [M] \cdot [T] + k_4 [D]^2 - k_6 \cdot [G] \cdot [T] + k_6 \cdot [M] \cdot [D] \\ \frac{d[S]}{dt} &= -k_4 \cdot [G] \cdot [S] + k_1 \cdot [M] \cdot [MeOH] - k_2 \cdot [M] \cdot [S] + k_2 \cdot [D] \cdot [MeOH] \\ &\quad - k_3 \cdot [D] \cdot [S] + k_3 \cdot [T] \cdot [MeOH] \\ \frac{d[MeOH]}{dt} &= k_4 \cdot [G] \cdot [S] - k_1 \cdot [M] \cdot [MeOH] + k_2 \cdot [M] \cdot [S] - k_2 \cdot [D] \cdot [MeOH] \\ &\quad - k_3 \cdot [D] \cdot [S] + k_3 \cdot [T] \cdot [MeOH] - k_3 \cdot [MeOH] \end{aligned}$$

---

Équation 2. *Modèle mathématique associé au modèle cinétique.*

---

dans lequel les constantes  $k_1$  à  $k_6$  ainsi que  $k_{-1}$  à  $k_{-6}$  sont homogènes à des  $\text{l.mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  tandis que  $k_7$  est homogène à des  $\text{s}^{-1}$ .

Un traitement mathématique complet de ce système serait long et fastidieux. Nous avons donc choisi d'effectuer la modélisation par ordinateur.

Dans le modèle présenté ci-dessus, les réactions (1), (2) et (3) représentent le schéma classique de la transestérification. Une réaction de transestérification étant toujours équilibrée, nous avons choisi dans un premier temps de prendre des constantes de vitesse égales pour la réaction de transestérification ainsi que pour la réaction inverse de méthanolyse. Devant l'échec de la méthode (résultats non représentés ici), nous avons proposé une modélisation plus réaliste, qui rend mieux compte des réactions réellement observées, en déplaçant les trois réactions vers la droite. D'autre part, les réactions (2) et (3) mènent à la formation d'espèces fortement encombrées stériquement. Cet encombrement stérique va avoir deux conséquences : tout d'abord, des molécules fortement encombrées sont moins stables puisque leurs liaisons doivent subir des tensions plus importantes. Ensuite, dans le cas de molécules encombrées, l'approche des réactifs est gênée par la présence des groupements déjà présents. Ainsi, l'encombrement stérique doit nécessairement diminuer la vitesse des réactions (2) et (3).

Nous avons donc choisi arbitrairement de prendre les facteurs 1, 0,8 et 0,5 respectivement pour les réactivités des espèces présentes dans les réactions (1), (2) et (3). Pour obtenir les constantes de vitesses relatives, ces facteurs sont à multiplier par le nombre de fonctions disponibles pour la réaction par molécule (la vitesse de réaction est en effet proportionnelle au nombre de fonctions).

Soit les constantes de vitesse relatives du tableau : les réactions (4), (5) et (6) représentent les

interestérifications possibles entre les différents composés choisis. Dans un premier temps, ces réactions sont négligées, leurs constantes de vitesse ramenées à zéro. Le système d'équations de l'équation 3 est ainsi obtenu.

$$\begin{aligned} \frac{d[G]}{dt} &= -k_1 \cdot [G] \cdot [S] + k_{-1} [M] \cdot [MeOH] \\ \frac{d[M]}{dt} &= k_1 \cdot [G] \cdot [S] - k_{-1} [M] \cdot [MeOH] - k_2 \cdot [M] \cdot [S] + k_{-2} [D] \cdot [MeOH] \\ \frac{d[D]}{dt} &= k_2 \cdot [M] \cdot [S] - k_{-2} [D] \cdot [MeOH] - k_3 [D] \cdot [S] + k_{-3} [T] \cdot [MeOH] \\ \frac{d[T]}{dt} &= k_3 [D] \cdot [S] - k_{-3} [T] \cdot [MeOH] \\ \frac{d[S]}{dt} &= -k_1 [G] \cdot [S] + k_{-1} [M] \cdot [MeOH] - k_2 [M] \cdot [S] + k_{-2} [D] \cdot [MeOH] \\ &\quad - k_3 [D] \cdot [S] + k_{-3} [T] \cdot [MeOH] \\ \frac{d[MeOH]}{dt} &= k_1 [G] \cdot [S] - k_{-1} [M] \cdot [MeOH] + k_2 [M] \cdot [S] - k_{-2} [D] \cdot [MeOH] \\ &\quad - k_3 [D] \cdot [S] + k_{-3} [T] \cdot [MeOH] - k_5 [MeOH] \end{aligned}$$

---

Équation 3. *Modèle mathématique associé au modèle cinétique simplifié.*

---

La dernière réaction représente l'élimination du méthanol « surchauffé ». Une constante de vitesse de 5 a été choisie dans un premier temps pour obtenir des courbes proches de celles obtenues expérimentalement.

La simulation a été réalisée grâce au logiciel Chemical Kinetics Simulator, développé par IBM [2]. Ce logiciel utilise une méthode stochastique, évaluant la probabilité de réaction à chaque étape et ne nécessite donc aucune connaissance de calcul formel.

### Premiers essais

Les concentrations en réactifs ont été choisies de telle façon que le rapport glycérol/ester méthylique soit égal à 1,2, rapport utilisé en conditions industrielles. Les résultats sont représentés dans la *figure 2* (page 166). Nous retrouvons ainsi l'allure classique des courbes obtenues en catalyse homogène (toutes les réactions étant pareillement accélérées). Il apparaît de plus que la teneur en glycérol diminue lors de la réaction, conformément à ce qui est attendu. La quantité de méthanol dans le milieu passe par un maximum puis décroît (*figure 3*, page 166).

Il est vraisemblable que la formation d'esters multiples soit favorisée par une concentration plus faible en méthanol dissous. En effet, le méthanol dissous a plus de chances de méthanoliser un ester triple qu'un ester simple (plus de sites disponibles) et va donc favoriser les monoesters au détriment des diesters. D'autre part, la présence de méthanol aurait tendance à limiter la conversion. Il pourrait donc être intéressant de voir l'effet de la vitesse d'« évaporation » du méthanol sur la sélectivité. Industriellement, il est possible de faire varier ce paramètre en changeant la géométrie du réacteur.

## Effet de la vitesse d'« évaporation » du méthanol

Dans le cas précédent, un facteur cinétique de 5 a été choisi pour la vitesse de disparition du méthanol. Nous avons effectué les mêmes calculs avec des facteurs 10, 5, 2, 1, 0,5, 0 (0 correspondant à un autoclave fermé). Les résultats sont présentés dans les figures 4 à 7 (page 166).

Comme il était prévu, une évaporation plus lente du méthanol, et donc une concentration plus importante dans le milieu, entraîne un déplacement des équilibres de transestérification. Ainsi, la disparition des triesters et diesters étant moins favorisée, la sélectivité en monoester chute. Cependant, dans un même temps, l'activité catalytique s'en trouve augmentée puisque la disparition des produits formés est moins marquée. La modélisation nous montre que ces deux effets se compensent et que la courbe sélectivité-conversion reste non affectée. Ainsi, il est favorable pour obtenir une activité plus importante de travailler avec un taux d'évaporation du méthanol élevé, qui pourrait être obtenu en changeant la forme du réacteur ou en travaillant en pression réduite (ce qui est rarement le cas dans ce type de réaction, où l'on risquerait de distiller le glycérol). Cependant, les effets observés sont relativement faibles et ce paramètre ne sera donc pas un facteur limitant pour la transposition en milieu industriel.

La modélisation ici présentée ne tient pas compte des réactions d'interestérification (notées (4), (5) et (6) dans notre modèle global). Il serait utile à ce point de vérifier l'hypothèse selon laquelle ces réactions sont négligeables.

## Ajout des réactions d'interestérification au modèle

### Hypothèses

Nous reprenons le modèle précédent avec un facteur cinétique de 5 pour l'élimination du méthanol, toutes choses restant égales par ailleurs.

Afin de faire varier les facteurs cinétiques des réactions (4), (5) et (6), nous devons observer une certaine cohérence thermodynamique. En effet, les réactions (4), (5) et (6) pouvant être considérées comme la somme de plusieurs réactions parmi les réactions (1), (2) et (3), certaines relations entre leurs facteurs cinétiques peuvent être établies.

Pour ce faire, notons, pour la réaction (i),  $k_i$  le facteur cinétique de la réaction directe et  $k_{-i}$  le facteur cinétique de la réaction réciproque. Enfin, notons  $K_i$  la constante d'équilibre de cette réaction qui, selon la thermodynamique, est égale à  $K_i = k_i/k_{-i}$ .

\* Réaction (4) : cette réaction peut être écrite de la manière suivante : (4) = (2) - (3).

Soit  $K_4 = K_2/K_3$ , ce qui correspond à  $k_4/k_{-4} = k_2 \cdot k_{-3}/k_{-2} \cdot k_3$ .

D'où, avec les valeurs précédemment choisies :

$$k_4/k_{-4} = 4,8$$

\* Réaction (5) : de même, (5) = (1) - (2).

D'où :

$$k_5/k_{.5} = 3,75$$

\* Réaction (6) : de même, (6) = (1) - (3)

D'où :

$$k_6/k_{.6} = 18$$

Enfin, nous avons choisi arbitrairement pour cette étude de prendre  $k_4 = k_5 = k_6$ . Les valeurs suivantes ont été étudiées pour le paramètre  $k_4$  : 0, 1, 2, 5, 10, 20, 50.

### Résultats

Les résultats sont présentés dans les *figures 8 et 9* (page 166). Les réactions (4), (5) et (6) n'ont donc aucune influence sur la rapidité de la réaction et une influence négligeable sur la sélectivité. Ces trois réactions ont ainsi un effet minime et il n'est pas possible actuellement de quantifier leur participation. Pour la suite de l'étude, nous choisissons donc de simplifier le modèle et de ne tenir compte que des équations (1), (2), (3) et (7).

Jusqu'à présent, nous n'avons pas tenu compte de la présence d'un catalyseur solide à sélectivité de forme. C'est ce qui va être étudié par la suite.

### Catalyseurs à sélectivité de forme sans limitation diffusionnelle

#### Hypothèses

Nous supposons pour la suite de l'étude l'existence de réactions non sélectives (réactions thermiques ou catalysées par la surface extérieure des catalyseurs).

Dans un premier temps, nous négligeons les facteurs diffusionnels. Ainsi, nous considérerons que la concentration des réactifs est homogène au sein du milieu et égale à la concentration des réactifs à proximité des sites actifs. De même, les phénomènes d'adsorption compétitive, d'empoisonnement de sites actifs, etc. ne seront pas traités ici. Un catalyseur à sélectivité de forme pourrait soit accélérer la réaction [1] et sa réaction réciproque, soit inhiber les autres réactions. Comme nous ne travaillons qu'avec une échelle de temps relative, nous ne traiterons que le premier cas. En effet, le second se déduit aisément par un simple changement d'échelle temporelle et ne donnera aucune différence quant aux sélectivités obtenues.

Ainsi, un catalyseur à sélectivité de forme va augmenter les constantes  $k_1$  et  $k_{-1}$  dans les mêmes proportions, sans modifier les autres. Un catalyseur *peu sélectif* augmentera aussi  $k_2$  et  $k_{-2}$  dans les mêmes proportions tout en laissant  $k_3$  et  $k_{-3}$  inchangés.

Nous étudions ici l'augmentation des constantes de vitesse d'un facteur 2, 5, 10, 20 et 50 pour un catalyseur *sélectif* et *peu sélectif*.

#### Résultats

Les résultats sont présentés dans les *figures 10 à 13* (page 166).

Il apparaît tout d'abord que le comportement de la réaction en présence de catalyseur *sélectif* et *peu sélectif* est totalement différent. En effet, alors que les deux types de catalyseurs accélèrent la réaction, la sélectivité en monoglycérides en fonction du temps est améliorée dans le cas d'un catalyseur sélectif et diminuée dans le cas contraire. Plus le catalyseur est actif (c'est-à-dire plus le rapport  $k_1/k_2$  est élevé), plus cet effet est marqué. Cela est vrai dans notre cas, avec l'hypothèse que le catalyseur accélère les réactions (1) et (- 1). Avec l'hypothèse inverse, c'est-à-dire une inhibition des réactions (2), (- 2), (3) et (- 3), c'est l'effet inverse qui serait observé puisque plus le rapport  $k_1/k_2$  augmente, plus le catalyseur est sélectif et moins il est actif.

Il est à noter que dans le cas de catalyseurs peu sélectifs, la sélectivité converge vers une valeur limite commune qui est atteinte d'autant plus rapidement que l'effet catalytique est marqué, alors que dans le cas du catalyseur sélectif, la valeur « palier de sélectivité » augmente avec l'activité relative du catalyseur, comme montré dans la *figure 14* (page 167).

Ainsi, une augmentation de l'activité du catalyseur peut conduire également à une augmentation significative de la sélectivité en fin de réaction. Dans le cas de notre simulation, cette sélectivité passe de 55 % dans le cas d'un catalyseur non sélectif (réaction en présence de catalyseur homogène) à 90 % dans le cas d'un catalyseur sélectif et très actif. Notons cependant que les valeurs données comme sélectivité limite sont purement indicatives et que seules les variations doivent être prises en compte. En effet, les sélectivités finales sont fortement dépendantes des coefficients choisis en début d'étude, et ces coefficients n'ont pas été corrélés avec la thermodynamique. Ainsi, par exemple, un catalyseur non sélectif donnera dans notre modèle une sélectivité finale de 55 % en monoglycérides alors que, industriellement, elle est proche de 40 %.

Un examen des courbes sélectivité/conversion (*figures 15 et 16*, page 167) montre que le catalyseur *peu sélectif* ne modifie que très légèrement la sélectivité en monoglycéride, tandis que le catalyseur *sélectif* augmente fortement cette sélectivité. Cela est dû au fait que le catalyseur *peu sélectif* accélère toutes les réactions sauf celles concernant le triglycéride, et que ce dernier n'intervient qu'en faible quantité et en fin de réaction. Sa plus faible vitesse relative de formation ne joue ainsi que peu sur la sélectivité finale.

### *Application*

Il apparaît que la présence de catalyseur *sélectif* ou *peu sélectif* peut être mise en évidence par une pente élevée au départ de la courbe conversion (*figures 10 et 11*, page 166), suivie d'une baisse brutale de cette pente, alors qu'un catalyseur non sélectif (type homogène, par exemple) serait caractérisé par une pente évoluant plus doucement.

Il est de plus possible de différencier le catalyseur *sélectif* du catalyseur *peu sélectif* par l'examen des deux autres graphiques. Le premier est caractérisé par une pente quasi nulle dans la courbe sélectivité/conversion (*figure 15*, page 166) en début de réaction, tandis que le second est caractérisé par une pente très forte sur la courbe sélectivité/temps (*figure 13*, page 167) pendant ce même début de réaction. Il nous est ainsi possible sans aucun calcul de juger de la sélectivité d'un catalyseur vis-à-vis de notre réaction, et ainsi de permettre une future optimisation de celui-ci.

Cependant, cette étude ne tenant pas compte de la diffusion, elle reste incomplète. Il est donc intéressant de modéliser les problèmes de diffusion au sein de la réaction étudiée.

## **Catalyseur à sélectivité de forme avec limite diffusionnelle - approche simple**

### *Hypothèses*

Selon la forme, la taille, l'hydrophilie, etc. du catalyseur solide, les réactifs peuvent avoir plus ou moins de difficultés à accéder aux sites actifs du catalyseur, modifiant ainsi le schéma réactionnel et perturbant les équations cinétiques. Ce problème peut être approché par la modélisation suivante : certains réactifs accèdent facilement aux sites actifs et seront toujours en quantité suffisante pour ne pas limiter les réactions. L'ordre de réaction est alors pris égal à zéro pour ces réactifs (dégénérescence d'ordre). L'accès des autres réactifs est limité par la diffusion, et d'après les lois de Fick, leur concentration sur les sites actifs est proportionnelle à la concentration dans le milieu. On garde ainsi un ordre 1 pour ces composés.

Dans le cas présent, de par l'hydrophilie du catalyseur ou de la famille de catalyseurs, un ordre 0 en glycérol sera choisi. De par sa faible taille et son hydrophilie, le méthanol devrait aussi recevoir un ordre 0. Cela conduirait cependant à une aberration. En effet, on atteindrait rapidement une concentration stationnaire nulle en méthanol dans le milieu (résultat issu de la modélisation, non représenté ici), et à moins de considérer que le catalyseur conserve du méthanol en permanence, l'hypothèse de non-limitation de la réaction par le méthanol n'est plus vérifiée (résultats non présentés ici). Les autres composés verront donc leur ordre de réaction fixé à 1.

### *Résultats*

Avec ces nouvelles hypothèses, la même étude que précédemment a été effectuée. Les résultats sont présentés dans les *figures 17 à 22* (page 167).

Les conclusions précédentes restent valables, y compris le caractère prédictif du modèle, ce qui nous conforte dans la validité des résultats. Le comportement réel de nos catalyseurs est bien entendu plus complexe que ces deux cas extrêmes, mais il est vraisemblablement un comportement intermédiaire entre les deux extrêmes présentés ici, ce qui nous fait penser que la prédictibilité du modèle est applicable à un cas réel.

## **CONCLUSION**

La modélisation de la réaction de transestérification du glycérol en présence de catalyseurs plus ou moins sélectifs a été effectuée. Celle-ci laisse apparaître un comportement caractéristique de chaque type de catalyseur, visible directement sans calcul sur les courbes conversion/temps et sélectivité/conversion. L'influence du paramètre diffusion a été étudiée et les conclusions avancées ne sont pas dépendantes de ce dernier. Les résultats de cette modélisation constituent donc un outil performant pour déterminer la sélectivité de catalyseurs et ainsi faciliter leur optimisation future.

## **Remerciements**

Les auteurs remercient particulièrement la société Stéarinerie Dubois et fils, l'Ademe et Agrice-Ademe pour leur soutien financier et pour les discussions scientifiques suivies avec MM. Gérard Defez et Emmanuel Roulleau (Stéarinerie) et Mme Magali Rocher (Agrice-Ademe).



## REFERENCES

1. VAN RHIJN WM, DE VOS DE, SELS BF, BOSSAERT WD, JACOBS PA (1988). *J Chem Soc Chem Commun*, 317-8.

2. <http://www.almaden.ibm.com/st/msim/>

## Illustrations

I Figures 1 à 7 | Figures 8 à 14 | Figures 15 à 22 |

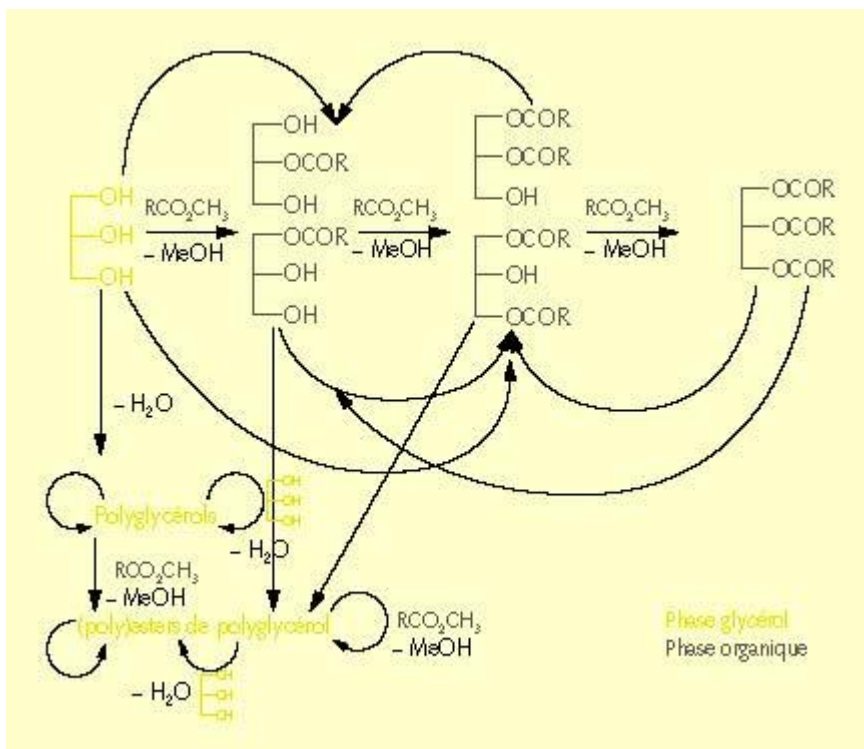


Figure 1. *Modèle cinétique complet.*

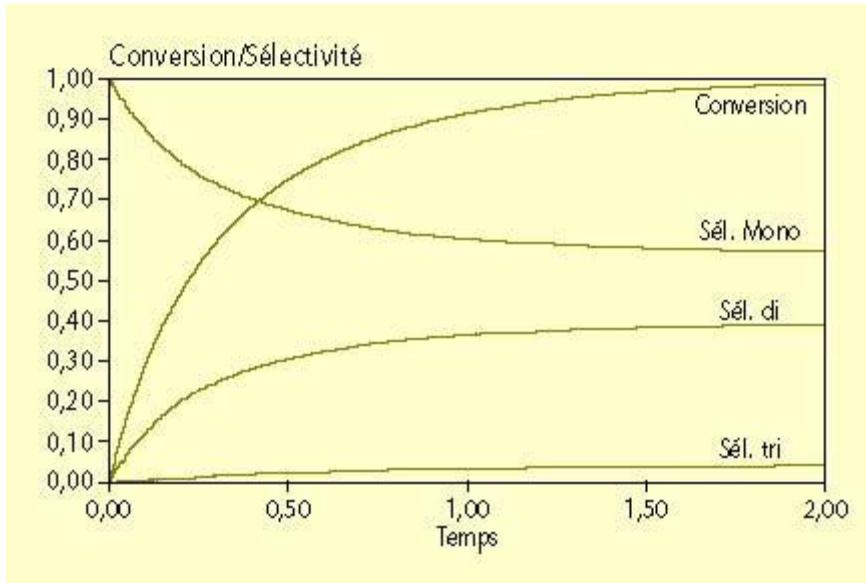


Figure 2. Sélectivité et conversion pour la réaction de transestérification industrielles (simulé).

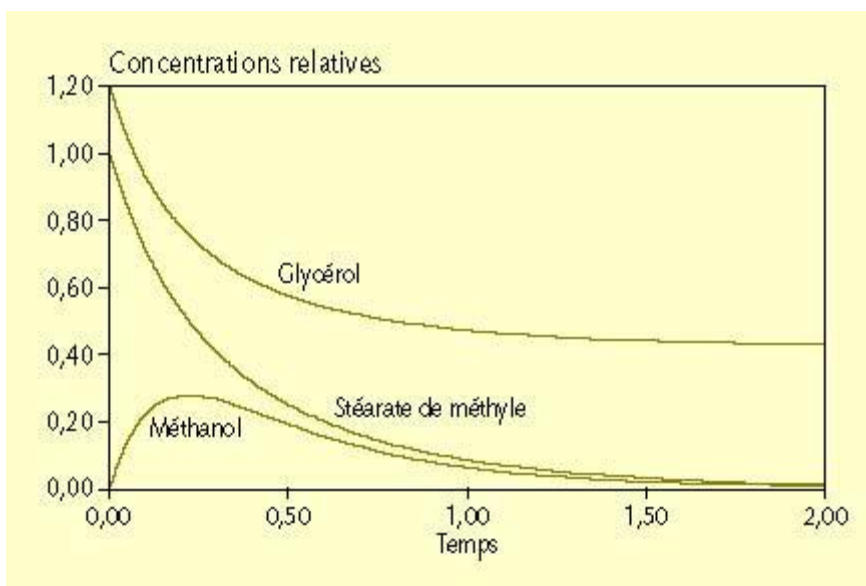


Figure 3. Concentrations en glycérol, méthanol et ester méthylique dans la réaction industrielle de transestérification (simulé).

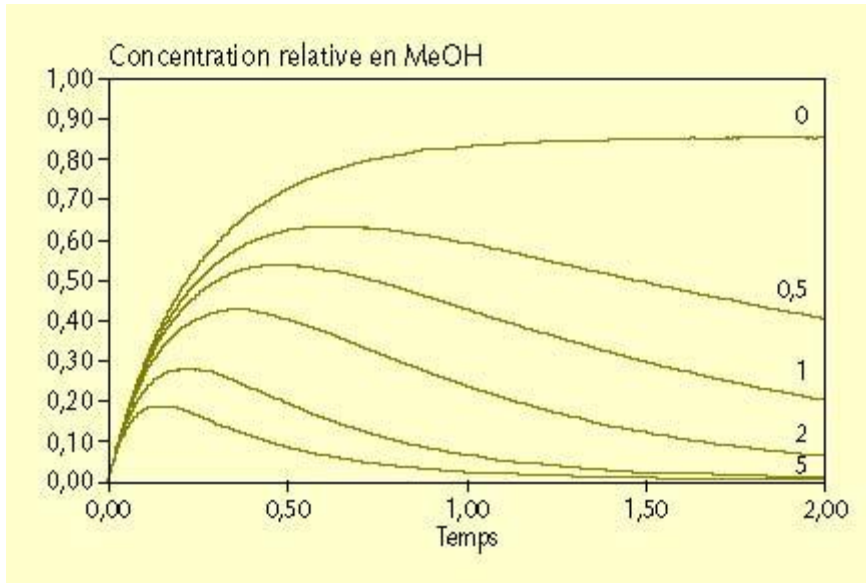


Figure 4. Concentration en méthanol dissous (simulé).

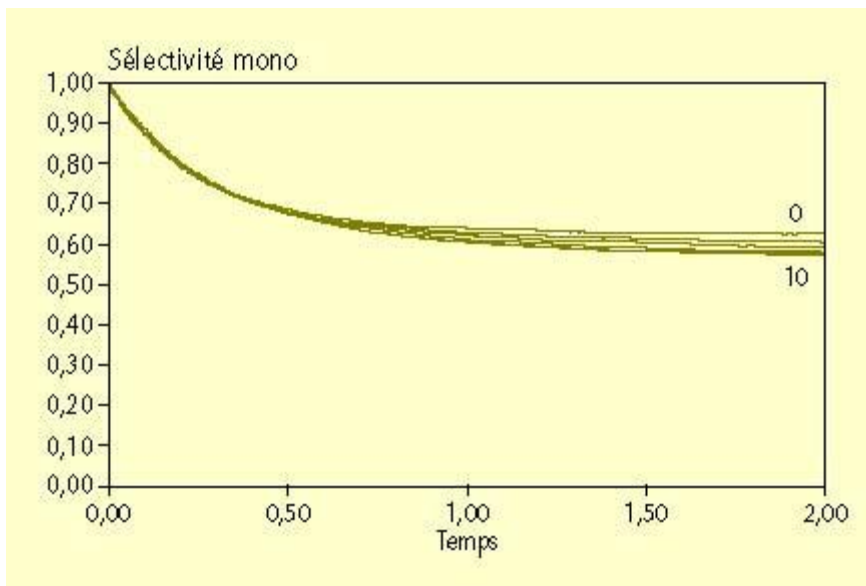


Figure 5. Sélectivité en monoglycérides (simulé).

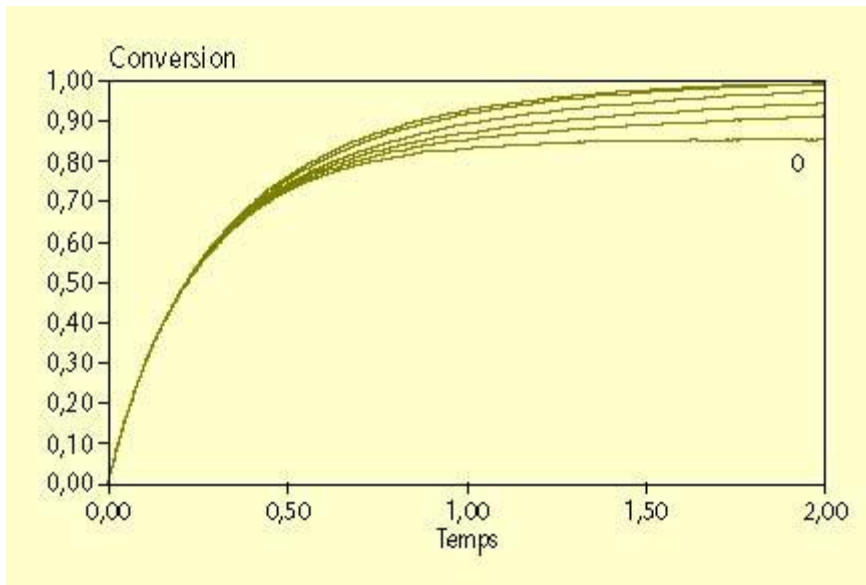


Figure 6. Conversion (simulé).

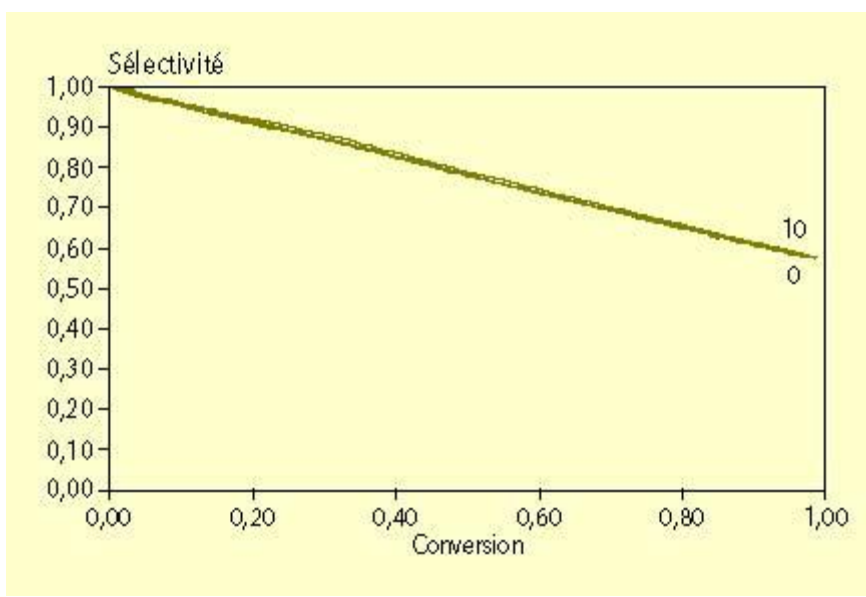


Figure 7. Sélectivité en monoglycérides/conversion (simulé).