
PETER STARSZYK, University of Waterloo

Inférence en cinétique chimique à partir de données de concentration directes et indirectes

De nombreux composés chimiques utilisés dans l'industrie agricole introduisent de grandes quantités d'arsenic dans le sol. Comme cette substance pose de graves risques environnementaux, la conception d'agents de décontamination sécuritaires et efficaces constitue un domaine de recherche très actif. Cette conception exige une grande compréhension de la cinétique chimique entre l'arsenic et les diverses substances géochimiques au niveau moléculaire. Cependant, les techniques de mesure directe à la fine pointe agrègent les mesures de concentration, ce qui rend impossible l'inférence des taux de réaction individuels. Nous proposons d'inclure la modélisation de données de spectrométrie de masse qui servent d'approximations indirectes des concentrations chimiques individuelles. L'étude cherche en définitive l'identifiabilité des paramètres à l'aide de données spectrales simulées et réelles.