



Magyar Tudományos Akadémia
Pécsi Területi Bizottsága

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM
Természettudományi Kar
Matematikai és Informatikai Intézet



MEGHÍVÓ

A PAB III. Matematikai és Informatikai Tudományok Szakbizottsága
és a PTE TTK Matematikai és Informatikai Intézete
tisztelettel meghívja Önt a soron következő tudományos ülésre

Dr. Rajkó Róbert

intézetünk egyetemi tanárának előadására

2019. október 16-án 17.30 órától az F/211-ben

***A kemometria matematikai és informatikai vonatkozásairól
címmel***

A kemometria a kémiai és analitikai kémiai információ minél teljesebb (optimális) kinyeréséhez szükséges egy és többváltozós matematikai statisztikai, (multi)lineáris algebrai, konvex geometriai, számítástechnikai (információtechnológiai) és formál logikai módszerek komplex/együttes használatát jelenti. Manapság már nemcsak a kémiai, de minden kapcsolódó (pl. környezettudományi, klinikai: omikák, stb.) tudományterületen kapott többváltozós, többdimenziós adat kiértékelését is magába foglalja. Az előadás szemelvényyszerűen áttekinti a kemometriában eddig elért fontosabb matematikai és informatikai vonatkozású eredményeinket: Borgen norma szabatos bevezetése; nem-negatív legkisebb négyzetek módszeréhez a „distance algorithm” felhasználása; a „data-based uniqueness”, azaz az adaton alapuló egyértelmű felbontás megfogalmazása és jellemzése; ill. a PLS-DA (Partial Least Squares-Discriminant Analysis) újszerű implementálása JAVA osztályok közül a hibákat tartalmazók kimutatására.

**Az előadásra és az azt követő kötetlen beszélgetésre
minden érdeklődőt szeretettel várunk!**

Dr. Jenei Sándor
elnök, PAB III. szb

Dr. Fialowski Alice
egyetemi tanár