



Appendix 2. Parameters of the linear trend are shown characterizing the relationship between measured and predicted amounts of minerals. All principal components (PCR-38, PLSR-38) and their optimized numbers (PCR-opt, PLSR-opt) by cross-validation are used in the models, based on non-background corrected spectra.

2. melléklet. A mért és a különböző modellekkel becsült ásványmennyiségek közötti lineáris trend paramétereit. A teljes (PCR-38, PLSR-38) és a keresztellenőrzés alapján optimalizált (PCR-opt, PLSR-opt) főkomponens számot használtuk a háttérkorrekció nélküli spektrumokon alapuló modellekben.

		Determinációs együttható <i>Coefficient of determination</i>			Merekség <i>Slope</i>			Tengelymetszet <i>Intercept</i>		
		PCR-38/ PLSR-38	PCR-opt	PLSR-opt	PCR-38/ PLSR-38	PCR-opt	PLSR-opt	PCR-38/ PLSR-38	PCR-opt	PLSR-opt
muszkovit	A	0,81	0,83	0,93	0,90	1,23	1,28	9,33	6,51	1,03
	N	0,89	0,91	0,95	0,87	1,20	1,23	8,04	1,60	0,38
	1d	0,87	0,61	0,68	1,06	1,09	1,12	6,75	11,38	11,69
	N1d	0,93	0,59	0,65	1,06	0,96	0,99	6,35	11,07	9,98
	2d	0,90	0,76	0,67	1,13	1,15	1,12	4,89	10,36	10,46
	N2d	0,92	0,70	0,72	1,06	0,96	0,95	4,77	10,84	10,68
illit	A	0,69	0,65	0,70	0,78	1,05	1,04	3,29	-4,20	-4,30
	N	0,54	0,77	0,84	0,71	1,03	0,98	2,73	-0,07	1,14
	1d	0,75	0,61	0,64	1,10	1,27	1,26	-5,32	-15,20	-14,83
	N1d	0,76	0,60	0,62	1,02	1,37	1,34	-5,47	-16,69	-15,22
	2d	0,86	0,60	0,57	0,95	1,18	1,11	-0,15	-20,10	-17,73
	N2d	0,88	0,59	0,62	0,94	1,30	1,28	-1,91	-17,65	-16,87
kvarc	A	0,88	0,91	0,89	1,06	1,08	1,07	-1,16	-3,55	-3,11
	N	0,93	0,92	0,93	1,12	0,97	0,98	-4,61	-2,34	-2,89
	1d	0,91	0,96	0,95	1,12	1,10	1,08	-2,88	-7,67	-6,55
	N1d	0,89	0,90	0,91	1,05	0,74	0,77	-2,65	4,60	3,18
	2d	0,89	0,92	0,95	1,13	1,05	1,05	0,65	-3,74	-3,88
	N2d	0,82	0,72	0,79	0,94	0,66	0,69	-0,05	5,43	5,95
földpát	A	0,89	0,98	0,94	0,73	0,98	0,93	-3,10	-2,81	-3,43
	N	0,95	0,90	0,87	0,79	0,57	0,55	-1,46	2,11	2,16
	1d	0,91	0,96	0,96	0,86	0,99	0,99	-0,98	0,50	-0,26
	N1d	0,97	0,94	0,94	0,89	0,54	0,54	0,19	3,33	3,34
	2d	0,83	0,92	0,90	0,83	0,86	0,85	-1,60	1,40	1,10
	N2d	0,95	0,95	0,94	0,88	0,46	0,46	0,86	3,45	3,59
dolomit	A	0,94	0,97	0,95	1,22	1,08	1,10	-1,17	-2,91	-0,71
	N	0,91	0,89	0,87	0,79	0,68	0,70	4,12	2,38	2,30
	1d	0,94	0,99	0,99	1,07	1,17	1,10	-1,32	-1,83	-1,71
	N1d	0,91	0,95	0,94	0,79	0,61	0,62	0,40	2,86	3,11
	2d	0,91	0,98	0,98	1,14	1,22	1,17	-5,64	-0,61	-0,56
	N2d	0,92	0,92	0,94	0,79	0,67	0,65	0,18	3,79	3,12
kalcit	A	0,90	0,98	0,98	0,93	1,01	0,99	-5,81	3,45	1,17
	N	0,87	0,95	0,96	0,70	0,77	0,76	-2,28	4,79	4,53
	1d	0,84	0,98	0,98	0,92	1,08	1,08	-0,18	-0,87	-1,09
	N1d	0,92	0,99	0,99	0,76	0,75	0,75	3,37	2,19	2,36
	2d	0,94	0,97	0,97	0,93	1,12	1,09	-0,96	-0,30	0,01
	N2d	0,97	0,98	0,98	0,79	0,79	0,78	1,32	2,59	2,10
szmektit	A	0,89	0,84	0,76	1,00	0,89	0,86	5,26	1,20	6,56
	N	0,78	0,77	0,68	0,88	0,79	0,72	7,68	3,08	4,68
	1d	0,39	0,57	0,60	0,45	0,54	0,56	11,37	12,20	11,86
	N1d	0,48	0,71	0,72	0,54	0,66	0,66	10,58	10,09	10,02
	2d	0,42	0,86	0,87	0,57	0,77	0,79	7,38	9,23	8,62
	N2d	0,62	0,90	0,89	0,71	0,88	0,88	7,01	7,08	6,99
kaolinit	A	0,95	0,96	0,96	0,91	1,11	1,11	-2,98	-1,74	-1,19
	N	0,96	0,97	0,97	0,85	0,99	0,97	-1,59	-0,20	-0,16
	1d	0,97	0,96	0,96	0,98	1,04	1,06	-1,82	-1,09	-1,57
	N1d	0,97	0,97	0,97	0,90	1,02	1,03	-0,52	-1,23	-1,15
	2d	0,96	0,95	0,96	1,03	1,10	1,12	-1,53	-0,67	-1,14
	N2d	0,96	0,96	0,96	0,99	1,06	1,07	-1,27	-0,27	-0,61
		MIN	MAX	SZÓRÁS	MIN	MAX	SZÓRÁS	MIN	MAX	SZÓRÁS
muszkovit		0,59	0,95	0,12	0,87	1,28	0,12	0,38	11,69	3,63
illit		0,54	0,88	0,10	0,71	1,37	0,18	-20,10	3,29	8,05
kvarc		0,72	0,96	0,06	0,66	1,13	0,15	-7,67	5,95	3,84
földpát		0,83	0,98	0,04	0,46	0,99	0,18	-3,43	3,59	2,25
dolomit		0,87	0,99	0,03	0,61	1,22	0,23	-5,64	4,12	2,57
kalcit		0,84	0,99	0,04	0,70	1,12	0,14	-5,81	4,79	2,56
szmektit		0,39	0,90	0,16	0,45	1,00	0,15	1,20	12,20	2,93
kaolinit		0,95	0,97	0,01	0,85	1,12	0,07	-2,98	-0,16	0,68

Appendix 3. Parameters of the linear trend are shown characterizing the relationship between measured and predicted amounts of minerals. All principal components (PCR-38, PLSR-38) and their optimized numbers (PCR-opt, PLSR-opt) by cross-validation are used in the models, based on background corrected spectra.

3. melléklet. A mért és a különböző modellekkel becsült ásvány mennyiségek közötti lineáris trend paramétereit. A teljes (PCR-38, PLSR-38) és a keresztellenőrzés alapján optimalizált (PCR-opt, PLSR-opt) főkomponens számot használtuk a háttérkorrigált spektrumokon alapuló modellekben.

		Determinációs együttható Coefficient of determination			Merekség Slope			Tengelymetszet Intercept		
		PCR-38/PLSR-38	PCR-opt	PLSR-opt	PCR-38/PLSR-38	PCR-opt	PLSR-opt	PCR-38/PLSR-38	PCR-opt	PLSR-opt
muskovit	A	0,92	0,70	0,92	0,96	1,16	1,37	6,77	7,35	1,53
	N	0,94	0,93	0,94	0,96	1,32	1,29	7,66	-0,46	-0,37
	1d	0,90	0,61	0,67	1,04	1,09	1,12	5,74	11,25	11,68
	N1d	0,96	0,58	0,63	1,09	1,00	1,02	5,23	11,54	10,90
	2d	0,93	0,75	0,67	1,18	1,14	1,12	3,91	10,30	10,46
	N2d	0,94	0,67	0,74	1,12	0,99	1,02	4,42	11,50	9,83
illit	A	0,74	0,65	0,74	0,81	1,11	1,04	-0,11	-7,03	-2,87
	N	0,56	0,79	0,82	0,68	1,05	1,01	2,48	-0,77	0,04
	1d	0,75	0,61	0,65	1,11	1,28	1,26	-6,23	-15,25	-14,93
	N1d	0,77	0,63	0,65	1,00	1,39	1,37	-5,20	-16,90	-15,77
	2d	0,81	0,60	0,57	0,80	1,17	1,10	-0,38	-20,29	-17,93
	N2d	0,82	0,57	0,60	0,75	1,29	1,22	-0,61	-18,97	-15,81
kvarc	A	0,91	0,92	0,85	1,18	1,23	1,09	-0,20	-6,37	-1,43
	N	0,92	0,90	0,90	1,25	0,99	0,95	-5,93	-1,13	-1,14
	1d	0,93	0,96	0,95	1,12	1,10	1,09	-2,09	-7,62	-6,52
	N1d	0,89	0,93	0,93	1,13	0,85	0,85	-4,13	1,13	0,71
	2d	0,92	0,92	0,95	1,19	1,04	1,04	-1,11	-3,49	-3,72
	N2d	0,88	0,80	0,82	1,03	0,76	0,77	-1,20	4,02	4,13
földpát	A	0,86	0,97	0,96	0,74	0,96	0,95	-4,69	-3,14	-3,34
	N	0,89	0,90	0,90	0,73	0,59	0,59	-3,83	1,23	1,07
	1d	0,91	0,96	0,96	0,85	0,99	0,99	-1,26	0,43	-0,35
	N1d	0,97	0,92	0,93	0,89	0,59	0,59	-0,56	2,75	2,72
	2d	0,79	0,92	0,90	0,80	0,87	0,85	-1,24	1,40	1,13
	N2d	0,94	0,94	0,92	0,86	0,52	0,52	0,58	2,98	3,08
dolomit	A	0,89	0,93	0,95	1,14	1,13	1,08	-1,04	-0,84	0,71
	N	0,85	0,82	0,85	0,78	0,63	0,63	0,92	4,70	5,02
	1d	0,93	0,99	0,99	1,07	1,16	1,11	-2,58	-1,89	-1,80
	N1d	0,92	0,93	0,93	0,79	0,57	0,57	-0,42	3,22	3,30
	2d	0,87	0,98	0,98	1,15	1,22	1,18	-6,40	-0,57	-0,48
	N2d	0,90	0,91	0,95	0,84	0,63	0,61	-1,20	3,97	2,99
kalcit	A	0,86	0,98	0,96	0,85	1,06	0,96	-5,14	0,10	-0,19
	N	0,89	0,96	0,96	0,65	0,67	0,67	2,52	2,69	3,01
	1d	0,82	0,98	0,98	0,91	1,08	1,08	0,71	-0,77	-0,94
	N1d	0,86	0,99	0,99	0,70	0,72	0,73	4,46	2,10	2,11
	2d	0,93	0,97	0,97	0,85	1,12	1,09	0,55	-0,12	0,19
	N2d	0,92	0,99	0,98	0,66	0,76	0,77	2,97	2,48	1,90
szmektit	A	0,86	0,72	0,80	1,08	0,81	0,88	11,30	4,79	2,91
	N	0,79	0,81	0,80	0,90	0,84	0,83	10,23	3,42	3,68
	1d	0,33	0,57	0,61	0,44	0,54	0,56	14,39	12,33	11,93
	N1d	0,45	0,73	0,74	0,59	0,69	0,69	11,79	10,16	9,78
	2d	0,46	0,86	0,87	0,64	0,76	0,79	9,89	9,23	8,60
	N2d	0,68	0,88	0,87	0,82	0,90	0,91	6,63	6,98	6,82
kaolinit	A	0,94	0,96	0,96	0,85	1,05	1,09	-4,21	-1,01	-2,36
	N	0,96	0,97	0,97	0,86	1,06	1,03	-2,73	-0,80	-0,28
	1d	0,96	0,96	0,96	0,96	1,04	1,06	-2,85	-1,10	-1,56
	N1d	0,97	0,96	0,96	0,95	1,09	1,09	-1,43	-1,47	-1,45
	2d	0,96	0,95	0,96	1,00	1,10	1,12	-1,59	-0,69	-1,15
	N2d	0,96	0,96	0,96	1,01	1,13	1,13	-1,37	-0,66	-0,73
		MIN	MAX	SZÓRÁS	MIN	MAX	SZÓRÁS	MIN	MAX	SZÓRÁS
muskovit		0,58	0,96	0,14	0,96	1,37	0,12	-0,46	11,68	4,11
illit		0,56	0,82	0,09	0,68	1,39	0,21	-20,29	2,48	8,05
kvarc		0,80	0,96	0,04	0,76	1,25	0,15	-7,62	4,13	3,28
földpát		0,79	0,97	0,04	0,52	0,99	0,17	-4,69	3,08	2,44
dolomit		0,82	0,99	0,05	0,57	1,22	0,25	-6,40	5,02	2,97
kalcit		0,82	0,99	0,05	0,65	1,12	0,17	-5,14	4,46	2,16
szmektit		0,33	0,88	0,17	0,44	1,08	0,16	2,91	14,39	3,36
kaolinit		0,94	0,97	0,01	0,85	1,13	0,08	-4,21	-0,28	0,97

#### 4. melléklet.

Az összefüggések szignifikanciájának vizsgálatára F- és t-próbát hajtottunk végre, azonban ezek az adatok fenntartással kezelendők, tekintve hogy a tesztmintákon bemutatott R<sup>2</sup> egy szűk csoportra (10 db geológiai minta) vonatkozik.

A nullhipotézis, hogy nem áll fenn lineáris összefüggés a modellben becsült és a mért ásványmennyiségek között. Ellenkező esetben a modell – a felhasználó által választott megbízhatóság mellett (95%) - elfogadható. F-próbával a modellek egyetlen kivétellel (szmektit háttérkorrigált és 1. derivált spektrumaival képzett (BG1der) modell)-szignifikánsnak tekinthetők. Nem ilyen egyértelmű azonban a modellek megítélése, ha a t-próba eredményét is megnézzük. A regressziós együtthatók közül a tengelymetszetek több esetben nem tekinthetők szignifikánsnak, a meredekségre viszont ez nem volt jellemző. Valószínűleg ebben szerepet játszik az, hogy a statisztikát kevés mintán tudtuk elvégezni, illetve hogy a mért értékeknek – főleg a nyomnyi mennyiséghez közeli tartományban – a relatív intenzitásarányokon alapuló XRD meghatározása is bizonytalanságot hordoz. Példaként az összes főkomponenssel és a keresztellenőrzés alapján optimalizált (opt) főkomponens számmal elvégzett, háttérkorrigált spektrumokon alapuló modellalkotás hipotézisvizsgálatának eredményét mutatjuk be.

#### 4. melléklet/a: F-próba során a kapott F-érték szignifikanciája

	BG	BGN	BG1der	BGN1der	BG2der	BGN2der
<b>muszkovit</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>muszkovit opt</b>	0.003	0.000	0.008	0.010	0.001	0.004
<b>illit</b>	0.001	0.012	0.001	0.001	0.000	0.000
<b>illit opt</b>	0.005	0.001	0.007	0.006	0.009	0.011
<b>kvarc</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>kvarc opt</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001
<b>földpát</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
<b>földpát opt</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>dolomit</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>dolomit opt</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>kalcit</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>kalcit opt</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>szmektit</b>	0.000	0.001	0.083	0.033	0.032	0.003
<b>szmektit opt</b>	0.002	0.000	0.012	0.002	0.000	0.000
<b>kaolinit</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>kaolinit opt</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>MIS</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.000
<b>MIS opt</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>csillám</b>	0.000	0.002	0.000	0.000	0.000	0.000
<b>csillám opt</b>	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

