

Nyugat- magyarországi Egyetem
Simonyi Károly Műszaki, Faanyagtudományi és Művészeti Kar

TDK DOLGOZAT

2014



FAANYAG TÍPUSOK OSZTÁLYOZÁSA ATR INFRAVÖRÖS SPEKTRUMOK ALAPJÁN

Készítette: Kiss Péter Áron

Témavezetők: Dr. Németh Zsolt István
Dr. Rákosa Rita

Tartalomjegyzék

Bevezetés	5
Szakirodalmi összefoglaló	6
1. Faanyag összetétele	6
1.1 Elemi összetétel	6
1.2 Cellulóz	6
1.3 Poliózok	7
1.4 Lignin	7
1.5 Extrakt anyagok	8
2. Faanyag infravörös spektruma	8
3. FT-IR spektrometria	10
3.1 FT-IR készülék részei	14
3.1.1 Interferométer	14
3.1.2 Fényforrás	15
3.1.3 Totálreflexiós (ATR) spektrometria	15
3.1.4 Detektor	16
4. Kemometriás csoportosítási módszerek	16
4.1 Osztályozás	18
4.2 Főkomponens elemzés (PCA)	21
4.2.1 Osztályozás főkomponens elemzés információtartalma alapján	23
Kísérleti rész	24
Célkitűzés	24
5. Vizsgált faanyagok és az alkalmazott FT-IR spektrométer	24
6. Jel/zaj viszonyt befolyásoló paraméterek	26
7. Faanyag FT-IR spektrumainak PCA elemzése	29

7.1 Faanyag típusokhoz tartozás jellemzése	
Mahalanobisi távolságok és Wilks-lambda értékek alapján	36
Összefoglalás	43
Köszönetnyilvánítás	44
Irodalomjegyzék	45
Melléklet (Scilab algoritmusok)	46

Bevezetés

A totálreflexiós (ATR) FT-IR spektrometriának az alkalmazása jelenleg még „gyerekcipőben jár”, kiaknázatlan lehetőség a faanyag tulajdonságainak jellemzésére. A rutinszerű protokollok kidolgozásához szükség van a fafurnér minták spektrális sajátosságát befolyásoló tulajdonságok feltérképezésére és optimálására. A TDK kutatás kiterjedt a totálreflexiós cink-szelenid (ZnSe) egykristály és a furnér érintkezési felületének, a furnér felületi érdességének és az erezet egykristályhoz viszonyított párhuzamos vagy merőleges illeszkedésének az FT-IR spektrumok jel/zaj minőségét befolyásoló szerepeinek tisztázására. A különböző faanyag típusok infravörös spektrumokon alapuló sokváltozós értékelésére főkomponens elemzést terveztünk. A domináns főkomponensek terében a fafaj szerinti csoportosulásokat, faanyag-osztályokat a fuzzy elemzés filozófiáján alapuló osztályokba tartozási valószínűségekkel, valamint Wilks-lambda értékekkel jellemeztük.

A kutatás kivitelezése a Kemometria, a Scilab programozás, a Faanyagtudomány és a Műszeres analitika diszciplinák terében a hallgatói ismeretszerzést helyezte előtérbe. Hangsúlyozni szükséges, hogy sem a TDK dolgozat szerzője és sem a témavezetők nem tekintik a kimunkált sokváltozós osztályozási minősítést a Faanatómiai módszerek és főleg nem az azzal foglalkozó szakemberek tudását helyettesítő alternatívának. Egy gyakorlott faipari mérnök a különböző faanyagok típusait ránézésre, a másodperc töredéke alatt pusztán szemrevételezéssel behatárolja. Ezzel szemben az FT-IR spektrometrián alapuló csoportelemzés idő- és költség igényesebb. Mindennek ellenére a kemometriai ismereteknek alkalmazására és a módszerek algoritmizálásának gyakorlására a faanyag spektrumok kiváló lehetőséget nyújtanak. A főkomponens elemzés alkalmazása és a totálreflexiós FT-IR spektrometriának optimálása fafurnér spektrumokra utat nyit az FT-IR spektrumokat magában foglaló sokváltozós kalibrációk kimunkálására, amelyekkel potenciális lehetőség adódik néhány faanyag tulajdonság becslésére (pl nedvességtartalom, peremszög, stb).

Szakirodalmi összefoglaló

1. Faanyag összetétele

1.1 Elemi összetétel

A faanyag a fotoszintézisnek a végterméke, így összetétele a szén-dioxid és a víz elemi összetételét tükrözi. A szerves anyagtartalom a fafajok átlagában a következő: szén 49,5%, oxigén 44,2%, hidrogén 6,3% (Németh, 1997). A szervetlen anyagok, a hamualkotók mennyisége 0,1-0,5 %. Ezen kívül más anyagok is találhatóak a fában, például fémek, de csak nagyon kis mennyiségben.

A sejtfal legfontosabb vegyületei a cellulóz, a hemicellulózok és a lignin. Ezeknek a részaránya látható az I. táblázatban.

I. táblázat: A sejtfal fontosabb vegyületei a főbb fafajcsoportoknál (%) (Molnár, 2004)

Fafajcsoport	Cellulóz (%)	Poliózok (%)	Lignin (%)
Tülevelűek	48-56	23-25	26-35
Lombosak	46-48	26-35	15-28

1.2 Cellulóz

A cellulóz a fatestnek körülbelül 40-55 %-át alkotja. A makromolekulában a legkisebb ismétlődő egység a cellobióz, melyben két β -D-glükóz egység glikozidos éterkötéssel kapcsolódik egymáshoz, az egyes és négyes szénatomon található OH-csoportok kondenzációs reakcióján keresztül. Az így kialakult cellulóz makromolekula lineáris. A cellulóz szálak szabad hidroxilcsoportjai intramolekuláris és intermolekuláris H-híd kötésekkel alakítanak ki egymással, így a kapcsolódó cellulóz szálak rostokat alkotnak. A szabályos ismétlődés és a fonal alakú struktúra lehetővé teszi a kristályos elrendeződést. Különböző kristályszerkezetek alapján többféle módosulatot is megkülönböztetünk. A cellulóz fibrilláris szerkezetű, kristályos és amorf részek is találhatóak a cellulóz mátrixban.

A cellulóz a közeli-ultraibolya és látható fény tartományában nem abszorbeálja a fényt, viszont infravörös tartományban a fényelnyelése aktív (Németh, 1997).

1.3 Poliózok

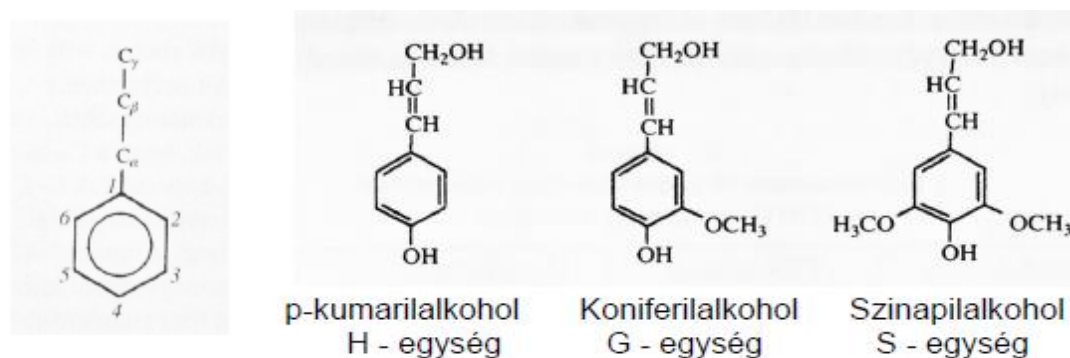
A poliózok tulajdonságaikban a cellulózhoz hasonló poliszacharidok, viszont több alapegységből épülnek fel, rövidebbek és egyéb tulajdonságokban is eltérhetnek. Átmenetet képeznek az amorf lignin és a kristályos cellulóz között (Németh, 1997). Ligninhez elsőrendű kötésekkel, míg a cellulózhoz hidrogén-híd kötéssel kapcsolódnak. Így a merev cellulózláncok mellett a faanyagoknak kellő rugalmasságot kölcsönöznek.

Az alapegységei pentózok, hexózok, hexuronsavak és dezoxi-hexózok. A polióz makromolekulák általában elágazó szerkezetűek és glikozidos éterkötéssel kapcsolódnak egymáshoz. A lombos és tűlevelő fajok poliózai között határozott különbségek mutatkoznak.

Az osztályozás leginkább a főlánc kémiai felépítése alapján lehetséges: xilánok, mannánok, glükánok, galaktánok.

1.4 Lignin

A lignin C-tartalma 58-64%, H-tartalma 6,1-6,5 %, O-tartalma 29-35% között változik. Bonyolult struktúrájú, ennek ellenére felépíthető fenil-propán egységekből, amelyek C-O, C-C kötésekkel kapcsolódnak egymáshoz. 3 alap fenil-propán egysége a p-kumarilalkohol, koniferilalkohol és szinapilalkohol.



1. ábra: fenil-propán alapváz és a lignin építőelemei (Németh, 1997)

Jellemző funkciós csoportjai a metoxilcsoport, alifás és fenolos hidroxilcsoport, karbonil- és karboxilcsoport. Hidroxilcsoportok nagy mennyiségben vannak jelen. Az aromás magra, illetve a propil oldalláncra kapcsolódhatnak. Ennek megfelelően fenolos vagy alkoholos jellegűek (Németh, 1997).

Metoxilcsoportokat a lombos fák másfélszer akkora mennyiségben tartalmazzák, mint a tűlevelűek. Karboxilcsoportok csak kis mennyiségben fordulnak elő, ezek is inkább a lombos fajokban. A karbonilcsoportok a fenil-propán egységek propánláncaihoz tudnak kapcsolódni.

1.5 Extraktanyagok (járulékos anyagok)

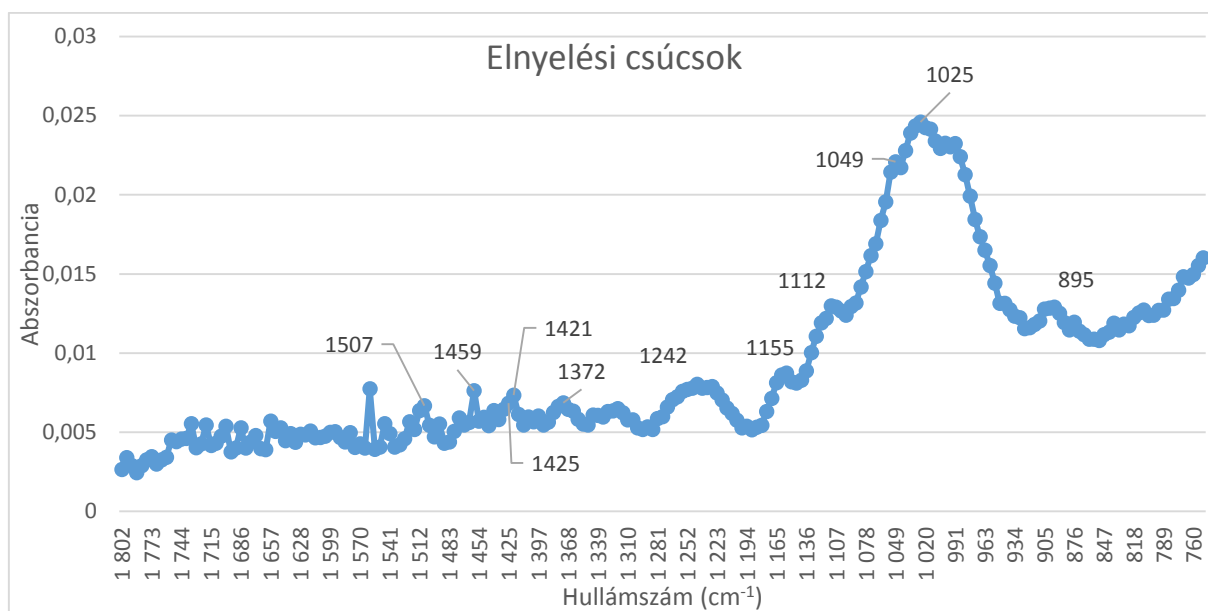
A makromolekulás anyagok mellett a faanyagban kis molekulatömegű, könnyen oldódó vegyületek is előfordulnak. Ezek az anyagok elsősorban nem a mechanikai tulajdonságokat, hanem például a faanyag színét, tartósságát, felületkezelését és ragaszthatóságát befolyásolják. A szíjácsban jóval kisebb mennyiségben fordulnak elő, mint a gesztben. Mivel a faanyag relatíve kis mennyiségben tartalmaz extraktanyagokat, ezért az infravörös spektrum fényelnyelési csúcsaihoz való hozzájárulásuk elenyésző a főösszetevők (cellulóz, hemicellulóz, lignin) fényelnyelési intenzitásaihoz viszonyítva.

Csoportosításuk:

- Egyszerű fenolok, polifenolok
- Terpének, gyanták
- További járulékos anyagok
 - Cukrok, ciklitek, zsírok-viaszok, alkaloidok

2. Faanyag infravörös spektruma

A lignocellulóz makromolekuláris anyagi halmazok tele vannak infravörös fényelnyelésre képes molekularészekkel, funkciós csoportokkal. Közülük a legkarakteresebbek a hidroxil- (OH), karbonil- (C=O), karboxil- (-COOH) és a karbonsav-észter (-COOC-) csoportok vegyérték és deformációs rezgéseik gerjesztési átmeneteihez tartoznak. A II. táblázat a faanyag jellegzetes infravörös fényelnyelési sávjait foglalja össze. A 2. ábra a juhar faanyagának példáján keresztül egy jellegzetes FT-IR spektrumot szemléltet. A faanyag eredő spektruma az infravörös aktív molekularészek fényelnyeléseinek a mennyiségi részarányok által súlyozott és összegzett kombinációja. Így, a faanyag összetettsége miatt a karakteres elnyelési csúcsok jelentősen átfednek egymással. A legnagyobb elnyeléseket a cellulóznak és a poliózoknak a jellegzetes funkciós csoportjai adják.



2. ábra: A faanyag jellemző IR-elnyelési csúcsai

II. táblázat: Faanyagra jellemző elnyelések (Preklet, 2006)

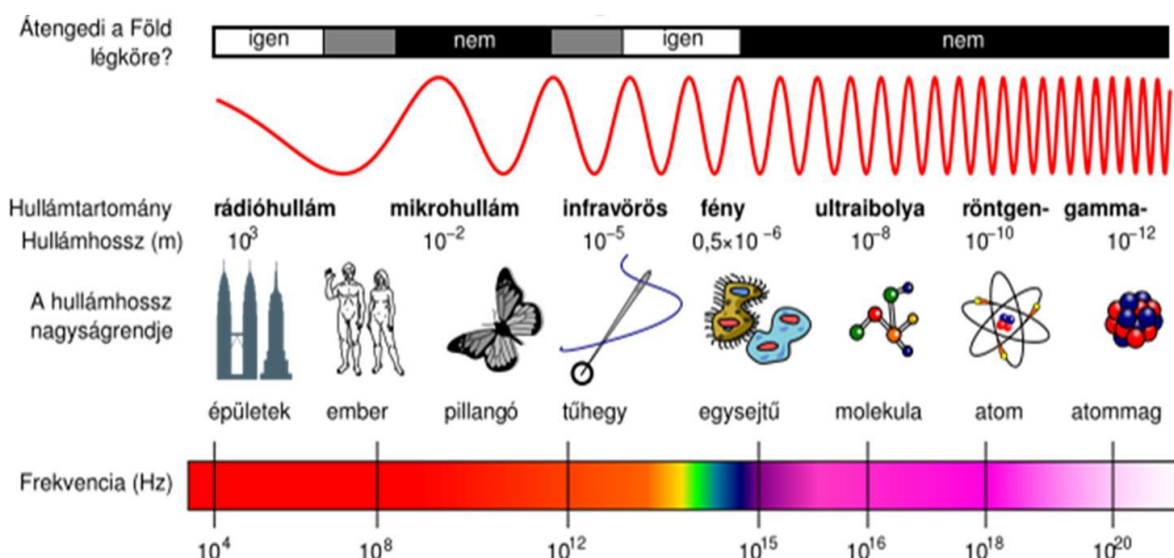
Hullámszám (cm-1)	Kémiai csoport
3470	OH-csoportok
3460-3412	a hidroxilcsoport vegyértékrezgése ligninben
3000-2842	Metil és metilén csoportok a ligninben
2930	CH és CH ₂ csoportok vegyértékrezgése (aszim.)
2905	CH és CH ₂ csoportok (szim.)
1740, 1730	C=O kötések a keton, acetil és karboxil csoportokban (nem konjugált)
1675-1660	C=O kötések a ligninben (konjugált)
1650, 1635	Víz
1605-1595	aromás vázrezgés a ligninben
1600	COO- ionok vegyértékrezgése (aszim.)
1595	aromás vázrezgés a ligninben

II. táblázat (folytatás)

Hullámszám (cm ⁻¹)	Kémiai csoport
1510	aromás vázrezgés a ligninben
1460	CH ₃ a ligninben és a hemicellulózban, CH ₂ a hemicellulózban
1430	CH ₂ a cellulózban
1425	COO ⁻ ionok vegyértékrezgése (szim.)
1370-1365	Metil és metilén csoportok a ligninben
1370	CH a hemicellulózban és a cellulózban
1336-1317	CH ₂ a cellulózban és a hemicellulózban, sziringil gyűrűk CH, CH ₂ , C-OH csoportjai
1270	guajacil gyűrűhöz kapcsolódó Caromás-O kötés
1240	C=O az acetil csoportokban
1230	guajacil gyűrűhöz kapcsolódó Caromás-O kötés C=O vegyértékrezgéssel
1160	C-O-C vegyértékrezgés a cellulózban és a hemicellulózban (aszim.)
1130	C-O-C vegyértékrezgés a cellulózban és a hemicellulózban (szim.) aromás gyűrűhöz kapcsolódó CH csoportok
1110	glükóz vegyértékrezgése OH csoportok
1055, 1032	C=O a cellulózban és a hemicellulózban
897	cellulózban a glükózegység C1-H kötése

3. FT-IR spektrometria

Az infravörös sugárzás elektromágneses sugárzás, amely a hullámszám alapján a látható fény és a mikrohullámú sugárzás közé esik. Az infravörös sugárzás a molekulák forgási és rezgési viszonyait változtatja meg (3. ábra).



3. ábra: Elektromágneses sugárzások

Az infravörös tartomány 3 fő részre osztható:

- közeli IR tartomány: $12,800\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$
- közepes IR tartomány: $4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$
- távoli IR tartomány: $400\text{--}10\text{ cm}^{-1}$

A molekulákon belül az atomok vibrációs és rotációs mozgásokat végeznek. Az atomok csak bizonyos diszkrét (kvantált) energiaszinteken rezeghetnek. Harmonikus oszcillátor modelljének, kvantált energiaszintjeit adja meg az 1. egyenlet:

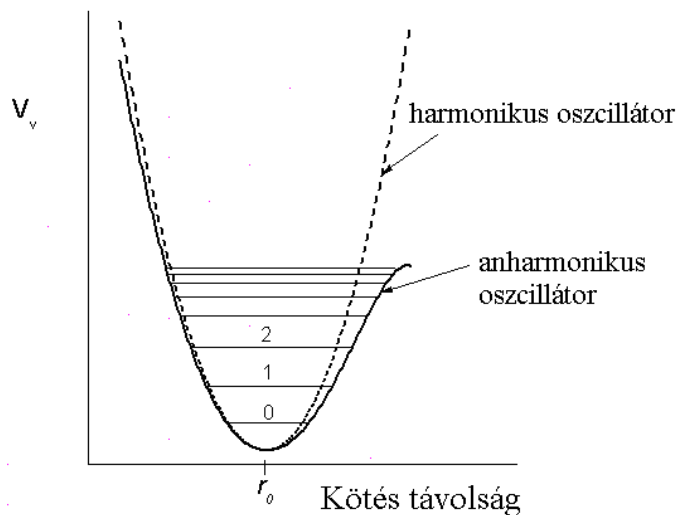
$$(1) \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu_{\text{rezgés}}, \text{ amelyben}$$

E_n a rezgés energia tartalma, $\nu_{\text{rezgés}}$ a rezgés frekvenciája, h : Plank állandó és $n= 0,1,2,3\ldots$ rezgési kvantumszám.

A valóságban a molekulákat anharmonikus rezgési állapotok jellemzik, mivel az egymással kötésben lévő atomok nem kerülhetnek tetszőlegesen közel egymáshoz, ill. nem távolodhatnak el végtelen távolságra egymástól. A molekuláris rezgések maximális amplitúdója a kémiai kötés felszakadása által korlátozott. A molekulák rezgési állapotai pontosabban leírhatóak az anharmonikus oszcillátor modellel (2. egyenlet):

$$(2) \quad E_n = \omega_0 \left\{ \left(n + \frac{1}{2}\right) - x_e \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 - y_e \left(n + \frac{1}{2}\right)^3 \right\} h\nu_{\text{rezgés}}, \text{ ahol}$$

ω_0 , x_e , és y_e konstansok. A harmonikus és az anharmonikus modellek rezgési állapotait, ill. a rezgési formák potenciál görbéit szemlélteti a 4. ábra.



4. ábra: Rezgési energia szintek

(http://foundation01.chem.elte.hu/Vegyesz_MSC/Rezgesi%20spektroszkopia%20alkalmazasa.pdf)

A rezgési állapot változásakor, a rezgési kvantumszámok változásával megváltozik a rezgést végző molekula energia tartalma. Az állapotváltozáshoz tartozó rezgési energiaváltozáshoz mindig társítható egy az energiaszintek közötti különbséggel azonos energiaértékű elektromágneses sugárzás, amely az adott rezgési átmenetet előidézni képes. A Planck-féle sugárzási törvény szerint:

$$(3) \quad \Delta E_{\text{rezgési átmenet}} = E_{n+1} - E_n = E_{\text{sugárzás}} = h\nu_{\text{sugárzás}}$$

A 3. egyenlet szerint a molekula csak olyan sugárzási energiát képes felvenni, ami megegyezik a gerjesztési energiaszintek közötti különbséggel. Ezt is csak abban az esetben, ha a molekula rendelkezik dipólus momentummal.

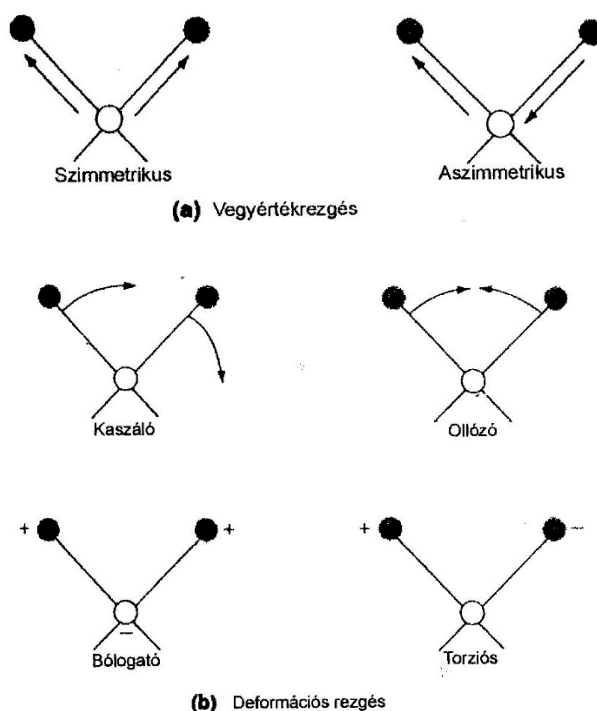
Vegyérték-, a kémiai kötések menti rezgések esetén a rezgés hullámszámát a 4. egyenlet határozza meg. A fényelnyelési sávokat (csúcsokat) a hullámszám függvényében ábrázolva kapjuk a különböző anyagok infravörös spektrumait.

$$(4) \quad \tilde{\nu}_{\text{rezgés}} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad \text{ahol}$$

c a fénysebesség (cm/s), k a kémiai kötés erőállandója (N/m) és μ a molekulában lévő atomok redukált tömege (kg).

Spektroszkópiában általában a rezgési kvantumszám $n=0$ -ról $n=1$ -re ugrik. Viszont a molekulák két energia szintet is ugorhatnak egyszerre. Ezen felharmonikus jelek sokkal kisebb intenzitásúak, de ők is megjelennek az eredeti elnyelés a kb. kétszeres hullámszámának környékén.

A molekuláris rezgési formákat két csoportba soroljuk. Megkülönböztetünk vegyérték- és deformációs rezgéseket. Vegyértékrezgések esetén a kötésszög nem változik, az atomok közelednek, illetve távolodnak a kötés mentén egymástól. Deformációs rezgéseknél viszont a kötéshossz változatlan és a kötésszög változik. Egy N atomos molekula rezgésszáma $3N-6$, illetve, ha a molekula lineáris, akkor $3N-5$. Megkülönböztetünk továbbá szimmetrikus és aszimmetrikus rezgéseket is. Előbbi nem infravörös aktív, mivel nem következik be dipólusmomentum változás. Degenerált állapotnak nevezzük az azonos energiájú kvantum-állapotokat (H. H. Willard és mtsai, 1988).



5. ábra: Molekuláris rezgések típusai (Kristóf, 2000)

Összetett molekulák esetén több funkciós csoport is található, amelyek többé-kevésbé hatással vannak egymásra. A spektrum értékelésekor egymástól függetlenül kezeljük a funkciós csoportokat.

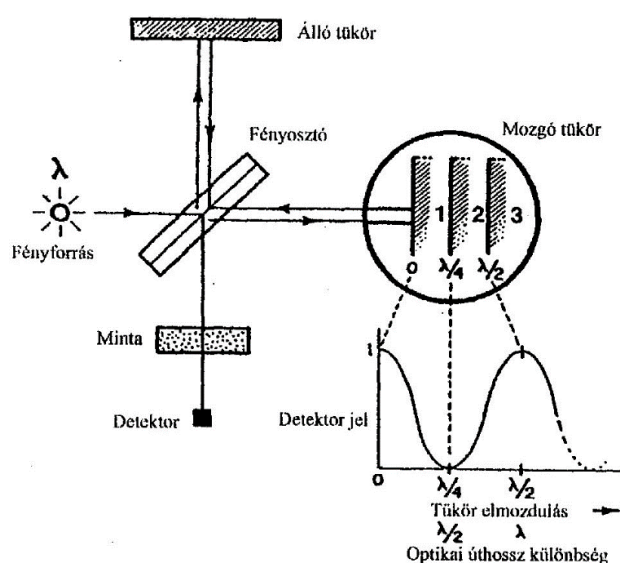
Az ujjenyomat tartományt 1400 cm^{-1} -es tartomány fölött értelmezzük. Az egyes funkciós csoportok elnyelései nem különülnek el, hanem az egymás közötti kölcsönhatások révén egy egységes szerkezetre jellemző spektrumot kapunk. A minták közötti kémiai eltérés jelentkezik a spektrumokban is, ezért alkalmazható a minták elkülönítésére.

3.1 FT-IR spektrométer fő részei

A spektrométer főbb szerkezeti egységei: sugárforrás, mintatér, analízátor, detektor, adatfeldolgozó egység. Az analízátor a szélessávú infravörös sugárzást adott spektrális felbontással diszkrét hullámhossz értékekre bontja (Kristóf, 2000).

3.1.1 Interferométer

A Michelson-féle interferométernek az optikai rácsokkal szemben előnye, hogy nem kell az hullámhossztartományt diszkrét lépésenként, hullámszám értékekről-hullámszám értékekre, egyesével felvenni. Az időben egymást követően felvett spektrumok átlagolhatóak (time of average elve), kisebb jel/zaj értékű spektrumokat kapunk a klasszikus monokromátorú, diszperziós spektrométerek által produkáltakhoz képest. A zajszint a párhuzamos mérések számának négyzetgyökével csökken.



6. ábra: Michelson-féle interferométer elvi vázlata (Kristóf, 2000)

A fényforrásból érkező fényt két egyenlő részre bontja a fényosztó. Egyik fele az álló-, a másik a mozgótükörre jut. Ha a mozgótükör 1-es helyzetben azonos távolságra van, mint az állótükör, akkor a két fénynyaláb újra egyesül. Ekkor maximális erősségű jelet kapunk. A tükröt a 2-es helyzetbe mozgatva minimális jelet kapunk, mivel ott kioltás megy végbe. Az interferogram egy, a Fourier transzformációnak megfelelő interferált fény lesz, ami különböző hullámhosszúságú és intenzitású koszinusz hullámok eredőjeként adódik. Más hullámhosszúságú fényt választva más-más koszinusz hullámot kapunk ugyanazon tükrömozgással. Polikromatikus fényforrást használva, melyben többféle hullámhossz szerepel, minden egyes hullámhosszúságú komponenshez egy egyedi koszinusz hullám rendelhető. Az interferogramból inverz Fourier-transzformációval előállítható a spektrum. Az FT-IR spektrometriás mérésnél először egy háttér-spektrumot veszünk fel, ami tulajdonképpen feketetestként sugárzó fényforrás spektrális radianciáját adja meg a hullámhossz függvényében (Kristóf, 2000). Ezután felvesszük a mintáról is a spektrumot. Az eredő spektrum a vizsgálandó anyag és a háttér fényelnyeléseinek az összegződése, ha az eredő spektrumból kivonjuk a háttér-spektrumot, akkor a vizsgálandó anyag spektrumát kapjuk eredményként.

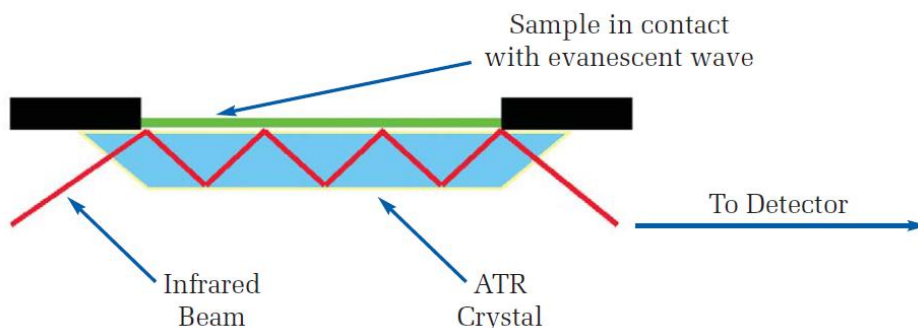
3.1.2 Fényforrás

A sugárforrás általában egy Nernst-égő, ami 1200-2200 K hőmérsékletre felfűtött ritkaföldfém oxidokból készült hengeres fűtőtest, vagy Globar-égő, ami egy 1300-1500 K hőmérsékletre fűtött szilícium-karbid rúd. A sugárforrás folytonos-feketetest sugárzást bocsát ki a kívánt mérési tartományban (Kristóf, 2000).

3.1.3 Totálreflexió (ATR) spektrometria

Az ATR feltét segítségével a felületek infravörös fényelnyeléséről kaphatunk információt. A mintának egy magas törésmutatóval rendelkező kristályra kell teljesen felfeküdnie. Az infravörös fénysugár egy meghatározott szögben lép be a kristályba, ahol folyamatos visszaverődések során érintkezik a mintával és egy része elnyelődik. Ezután a sugarak elhagyják a kristályt és a detektorba jutnak (lásd 6. ábra). A sugárzás csak 0,5-5 μm mélyen hatol be a mintába, ezért elengedhetetlen a minta jó felfekvése és a felület simasága.

A kristály anyaga cink-szelenid (ZnSe), ez egy olcsó megoldás, hátránya, hogy a kristály könnyen karcolódik és a savállósága is gyenge. Germánium kristályok már ellenállóbbak. A legjobb tulajdonságokkal a gyémánt rendelkezik.



7. ábra: Totálreflexió feltét kristálya

3.1.4 Detektor

Piroelektromos anyagok elektromos polarizációja az elektromos tér megszűnte után a hőmérséklettől erősen függő mértékben is megmarad (Kristóf, 2000). A detektor két elektródból épül fel, melyek közül az egyik átengedi az infravörös fényt. Az elektródák között deuterált triglicin-szulfát (DTGS) van, ami piroelektromos tulajdonságú anyag. Az anyag töltéeloszlása megváltozik, hőmérsékletváltozás hatására, ami áramként mérhető. A Michelson-féle interferometriás fényfelbontásnak köszönhetően a detektor a fényforrásnak az interferogramját érzékeli, ill. állítja elő. A detektált interferogramokból inverz Fourier-transzformációval szoftveresen állítjuk elő a spektrumokat.

4. Kemometriás csoportosítási módszerek

Nagy adathalmazokat általában mátrixok formájában reprezentáljuk, ill. kezeljük. Általánosan elfogadott, hogy az adatmátrixok sorai az egyes objektumokat, oszlopai pedig ezek tulajdonságait, jelölik. A kemometriás inputmátrixok elemei a sorszám által meghatározott objektumokhoz tartozó és az oszlopszámok által meghatározott tulajdonságoknak a mérőszámai.

$$\mathbf{D}_{IJ} = (d_{ij}) = \begin{bmatrix} d_{11} \dots d_{1j} \dots d_{1J} \\ \dots \\ d_{i1} \dots d_{ij} \dots d_{iJ} \\ \dots \\ d_{I1} \dots d_{Ij} \dots d_{IJ} \end{bmatrix} \quad i = 1, 2, \dots, I; \quad j = 1, 2, \dots, J$$

8. ábra: Kemometriában alkalmazott adatmátrixok (Szepesvári, 2001)

Az oszlopok által meghatározott tulajdonságtérben az objektumok a tulajdonságértékeik, tulajdonságtérbeli koordinátái alapján konkrét pontokként jelennek meg. Az objektumok pozíciója a tulajdonságtérben jelentéstartalommal bír. Az objektumpontok közti távolságok értékelése alapján pontcsoportosulások értelmezhetők. Az m dimenziós tulajdonságtérbeli pontcsoportosulások, ill. körvonalazható alakzatok értelmezése matematikai algoritmusok nélkül nehézkes, sok esetben pedig lehetetlen. Ezért az adathalmazban rejlő, csoportosulásokat megtestesítő információhoz általában csak sokváltozós alakfelismerő eljárásokkal juthatunk hozzá. Adathalmazok csoportelemzéseire számos többváltozós módszert dolgoztak ki. A leggyakrabban alkalmazottaknak a funkcionális rokonságaikat kifejező, faágstruktúra szerű összefoglalását szemlélteti a 9. ábra. A csoportelemzési eljárásokat gyakran alakfelismerési eljárásoknak is nevezik. A struktúra első szintjén a módszerek közötti különbség azt fejezi ki, hogy az objektumokat csak egy (éles csoportosítások) vagy több csoporthoz (átfedő-, életlen csoportosítások) tartozónak is tekintjük. Nem felügyelt alakfelismerésnél (csoportelemzés) nem rendelkezünk kezdeti felosztással, viszont az eljárás végén csoportokat kapunk. Felügyelt alakfelismerésnél rendelkezünk előre meghatározott csoportokkal (tananyagok) és az objektumokat ezek közé soroljuk be. Ezért a felügyelt alakfelismeréseket osztályozásoknak nevezzük (Borosy, 2001).



9. ábra: Az alakfelismerési eljárások csoportosítása (Borosy, 2001)

A kísérleti részben infravörös spektrumok alapján a különböző faanyag-minták fafaj típusok szerinti többdimenziós tulajdonságtérbeli csoportosulása is látható. A csoportosulások jellemzéséhez és mértékeik számszerűsítéséhez a fuzzy csoportelemzés alaptulajdonságát - nevezetesen, hogy mindegyik objektum mindegyik csoporthoz valószínűségi alapon tartozónak tekintendő – használtunk fel. Ezért a fuzzy elemzés funkcióját a következőkben részletesebben bemutatom.

4.1 Életlen (fuzzy) csoportosítás

A kiindulási adathalmaz elemeit mindegyik csoporthoz tartozónak tekintjük, csupán a csoporthoz **tartozási valószínűség változik**.

A legegyszerűbb és legáltalánosabban ismert életlen csoportelemző módszer a c-közép (vagy életlen K-közép) eljárás. Ennek során az úgynevezett életlen („fuzzy”) eltérés-négyzetösszeget kell minimalizálni (Borosy, 2001).

$$(5) \quad FSSQ = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K u_{n,k}^f d_{n,k}^2$$

$$(5.1) \quad d_{n,k}^2 = \sum_{m=1}^M (x_{m,n} - c_{m,k})^2$$

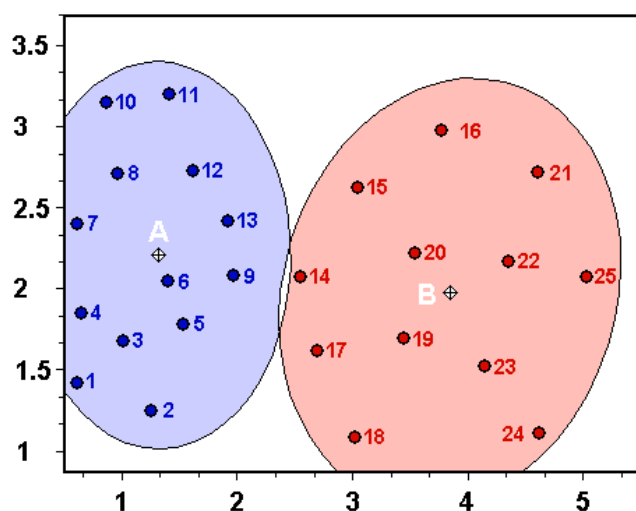
ahol az u az n -edik objektum k -adik csoportba tartozási valószínűségét, a d az n -edik objektum és a k -adik csoport súlypontja közötti távolságot, $f(<1)$ az életlenségi paramétert jelöli.

Minél nagyobb az f értéke, annál életlenebb lesz a felosztás (Borosy, 2001). A K-közép módszerhez hasonlóan itt is meg kell adnunk egy kezdő felosztást. Ezt követően származtatjuk a kiindulási súlyértékeket, majd az új súlyértékeket és az új súlypontokat.

$$(5.2) \quad u_{n,k} = \frac{1}{\sum_{c=1}^K \left(\frac{d_{n,k}}{d_{n,c}} \right)^{\frac{2}{f-1}}}, \text{ ahol}$$

f az életlenségi paraméter, $u_{n,k}$ az n -edik objektum k -adik csoporthoz tartozási valószínűsége és $d_{n,k}$, ill. $d_{n,c}$ a c -edik az n -edik objektum k -adik, ill. c -edik csoportközépponttól vett távolsága.

Az algoritmus akkor zárul le, ha két egymást követő ciklus súlyértékei közötti különbség egy küszöbértéknél kisebbé válik. Így nemcsak a csoportosítást végezzük el, hanem arról is kapunk információt, hogy a súlytényezők alapján mekkora az adott csoporthoz tartozási **valószínűség**. Ezáltal következtethetünk a csoportosítás helyességére és a besorolás egyértelműségére is. A csoportosítás egy mátrixszal írható le, melynek sorai az objektumok, oszlopai a csoportok, s az egyes értékek a súlyok. A súlyértékeknél alkalmazott kikötés, hogy egy elemre nézve a súlyértékek összegének 1-et kell adnia.



10. ábra: Két dimenziós A és B objektumhalmazok tulajdonságtérbeli elhelyezkedése

III. táblázat: A és B halmazok objektumainak csoportba tartozási valószínűségei

Objektum	A csoporthoz tartozási valószínűség	B csoporthoz tartozási valószínűség
1	0,9839	0,0161
2	0,9819	0,0181
3	0,9973	0,0027
4	0,9948	0,0052
5	0,9901	0,0099
6	0,9565	0,0444
7	0,994	0,006
8	0,9979	0,0021
9	0,9536	0,0464
10	0,981	0,019
11	0,9723	0,0277
12	0,9915	0,0085
13	0,9676	0,0324
14	0,505	0,495
15	0,0804	0,9196
16	0,0547	0,9453
17	0,1951	0,8049
18	0,006	0,994
19	0,0023	0,9977
20	0,0003	0,9997
21	0,0173	0,9827
22	0,0012	0,9988
23	0,0018	0,9982
24	0,019	0,981
25	0,0104	0,9896

Lehetőségünk van az optimális csoportszám meghatározására is. Például a Bezdek-féle felosztási együttható a csoportszám függvényében maximummal rendelkezik. Értéke $1/k$ és 1 között változik.

$$(5.3) \quad F_k = \sum_{n=1}^N \sum_{k=1}^K (u_{n,k})^2 / N, \text{ ahol}$$

N az objektumszám, K a csoportok száma és u a súlytényező.

4.2 Főkomponens elemzés (PCA)

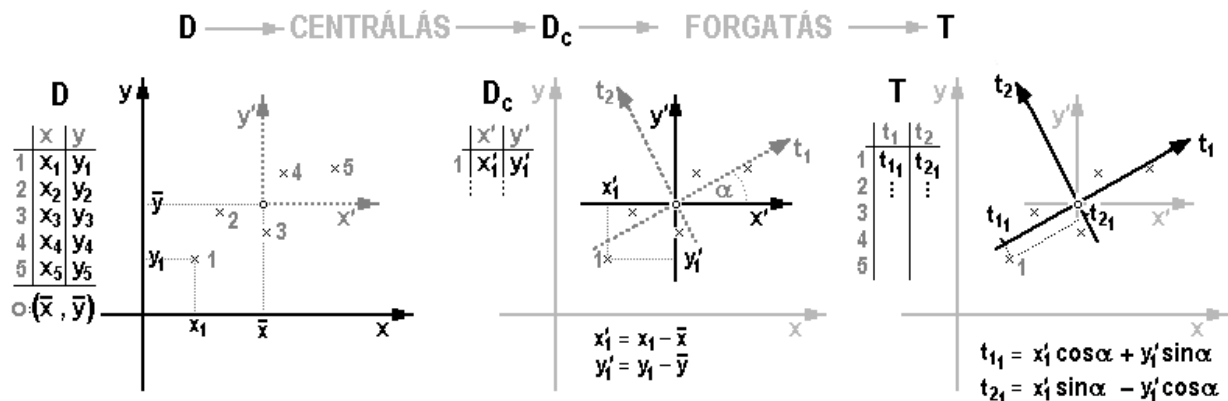
Az eredeti változókon olyan transzformációt hajtunk végre, ami új korrelálatlan változókat eredményez. Ezek az új változók a főkomponensek, amelyek az eredeti változók lineáris kombinációi. A transzformáció ortogonális, ezért lesznek korrelálatlanok az új változók.

A transzformáció lényege, hogy a kiindulási, centrált D_c adatmátrixot két mátrix szorzatára bontjuk

$$(6) \quad \underset{n,m}{D_c} = \underset{n,p}{T} \cdot \underset{p,m}{P}^T$$

ahol T (score) a főkomponens vektorok mátrixa és P (loading) a főkomponens-együtthatók mátrixa, p a D_c mátrix rangja.

A főkomponens elemzéssel végrehajtott mátrixszorzatra történő felbontás koordináta geometriai transzformációját, kétdimenziós D input adatmátrix esetére szemlélteti a 11. ábra.



11. ábra: PCA felbontás két dimenziós koordináta transzformációja

A PCA felbontást megelőzően az input mátrixot a tulajdonságok (oszlopok) szerint centráljuk ($D \rightarrow D_c$). Ezután a centrált adathalmazra regressziós egyenest illesztünk. Ez a regressziós egyenes lesz, a PCA felbontást követően az új vonatkoztatási koordináta rendszer első tengelye (első főkomponens tengely), s erre merőlegesek a további főkomponens tengelyek. A D mátrix objektumainak új koordináta értékeit tartalmazza a PCA felbontás „score” mátrixa (T), amíg az új vonatkoztatási koordináta rendszer egység vektorait a centrált mátrix koordináta rendszerében a „loading” mátrix (P) határozza meg. A PCA felbontásnak a mátrixszorzata egy többdimenziós objektummátrix transzformáció, amellyel az adathalmaz objektumainak új koordináta értékeit, a T mátrixot egy transzformációs P mátrixszal való szorzással az új vonatkoztatási koordináta rendszerbe, a főkomponensek terébe vetítjük.

A főkomponensek tengelyei mentén az objektumok koordinátaértékei más főkomponens tengelyekéihez képest korrelálatlanul és eltérő mértékben szóródnak. A főkomponensek varianciáit az objektumok főkomponens tengelyekhez tartozó koordinátaértékeiknek szórásai határozzák meg. Az egyes főkomponens tengelyekre kapott varianciák egyértelműen jellemzik az adathalmaz térbeli kiterjedését.

A T és P mátrixok oszlopai által meghatározott főkomponenseket a magyarázott variancia szerint csökkenő sorrendbe rendezve adjuk meg ezen mátrixokban. A nagyon kicsi varianciájú főkomponensek elhanyagolhatóak, így akár jelentősen is csökkenthetjük az adathalmaz tulajdonságait leíró, ill. térbeli kiterjedésüket jellemző kvázi változóknak a számát.

A P mátrix oszlopainak a korreláltatása adja az ún. „Loading plot” ábrákat. Segítségükkel képet kapunk az eredeti adatmátrix tulajdonságainak (oszlopainak) fontosságáról, ill. közöttük fennálló korrelációs viszonyról. Értelmezésével megállapítható, hogy a kiindulási mátrix tulajdonságai között fellelhető-e korrelációs kapcsolat, illetve, hogy mekkora mértékben járulnak hozzá a főkomponensek kialakításához. A P mátrix transzformációs mátrix.

A „Score” mátrix (T) csoportelemzési célokra használható fel. A T mátrix oszlopainak korreláltatása ún. „Score plot” ábrákat szolgáltatnak, amelyek az adott oszlopok főkomponenseinek síkjában vizualizálják az adathalmaz pontjainak térbeli helyzetét. Az adott „Score plot”-ok az adathalmaznak az adott főkomponensek síkjára vonatkozó vetületei.

A felbontás sajátérték-sajátvektor felbontással, szinguláris értékfelbontással és NIPALS algoritmussal is elvégezhető.

Az adathalmaz térbeli kiterjedését uraló főkomponensek számát a következő módszerekkel becsülhetjük:

- megmagyarázott variancia előírt százaléka (pl. 90 - 98 %)
- keresztellenőrzés
- hegyomlás ábra: Ebben az esetben a sajátértékeket ábrázoljuk a hozzájuk tartozó főkomponensek függvényében. Az ábrán egy törés látható, a töréshez tartozó főkomponens értéket leolvasva becsülhetjük meg a szükséges darabszámot.

4.2.1. Osztályozás főkomponens elemzés információtartalma alapján

Amennyiben az első néhány főkomponens magyarázza a teljes variancia 70-80 %-át, akkor a hasznos főkomponensek felhasználhatók csoportelemzési célokra is. Az egyes főkomponens vektorokat egymással korreláltatva megkapjuk a „Score plot”-okat. Ezeken az ábrákon az egyes objektumok pontokként jelennek meg a főkomponensek terében. Az objektumok közötti különbségek az egymáshoz viszonyított távolságokban jelennek meg. Az összes hasznos főkomponenst figyelembe véve következtetéseket vonhatunk le az objektumok csoportosulásáról, a kiindulási adathalmazhoz képest jóval kevesebb adat felhasználásával.

Kísérleti rész

Célkitűzés

1. A fafurnér FT-IR spektrumában a jel/zaj viszony értékváltozásainak feltérképezése
2. Az FT-IR spektrometrián alapuló faanyag-osztályok megkülönböztethetőségeinek jellemzése

5. Vizsgált faanyagok és az alkalmazott FT-IR spektrométer

Felhasznált furnérok:

- Juhar
- Kőris
- Tölgy
- Erdei fenyő
- Bükk
- Cseresznye

Készülék: HATR 10 totálreflexiós kiegészítőegységgel felszerelt Shimadzu IRAffinity-1 FT-IR spektrométer. (12. ábra)



12. ábra: Spektrométer és a totálreflexiós feltét

IR spektrumok felvétele: A szakirodalmakban közölt faanyag infravörös spektrometriás vizsgálatokban minta-előkészítés során a faanyagot porították és a kapott faporból KBr-os pasztillázással készítettek pasztilla mintákat. A pasztillázás előnye, hogy homogénizált mintákat kapunk, ami csökkenti a párhuzamos infravörös spektrumoknak az eltéréseit, szórásait. (C. Wu és mtsai, 2012) (N. Bobby és mtsai, 2012). A pasztillázás hátránya, hogy a

minták előkészítése hosszadalmas. Kísérleti tervünk alapján, eltekintettünk a minták pasztillázásától. Megvizsgáltuk, hogy milyen eredmények érhetőek el, ha furnér csíkok felületéről vesszük fel a spektrumot. A felület minőségét csiszolással és portalanítással javítottuk. A furnér lapokról a közepes infravörös tartományon belül ($4000-670\text{ cm}^{-1}$) spektrumokat vettünk fel az FT-IR-ATR készülékkel. Minden egyes méréskor új háttér-spektrumot vettünk fel. A jel/zaj viszony az egymást követő párhuzamos mérések átlagolása következményeként a mérések számának négyzetgyökének megfelelő arányban csökken. Mintánként származtatott átlagspektrumok 49 egyedi spektrumot foglalnak magukban, amelyeket 1 cm^{-1} -es felbontással vettünk fel.

Adatelőkészítés: A spektrumok felvételét követően minden egyes spektrumon ún. atmoszféra korrekciót alkalmaztunk, amellyel a levegőben lévő vízgőz és a szén-dioxid okozta fényelnyelési csúcsok utólagosan eltávolíthatók voltak. A sokváltozós értékeléseket a spektrumok 750 és 1800 cm^{-1} tartományára szűkítettük, majd a felbontást a mozgó átlag módszerrel 5 cm^{-1} értékre növeltük, egyrészt a zajamplitúdónak a további, másrészt a feldolgozandó adatmennyiség számának csökkentése végett.

SNV (Standard normal variate): A főkomponenselemzéshez felhasznált, szűkített tartományú spektrumokon SNV adatelőkészítést alkalmaztunk. Az SNV ugyan eltünteti a spektrumok mennyiségi abszolút információ tartalmát, azonban a totálreflexiós egykristályhoz való „felfekvés”, illeszkedés eltéréseit tudjuk alkalmazásával utólagosan kompenzálni. A fényelnyelés aktív összetevőinek egymáshoz viszonyított mennyiségi arányai, a relatív mennyiségi információk, az SNV-t követően sértetlenül a spektrumban maradnak. Az SNV további előnye az is, hogy a spektrumok alapvonal „sodródásait”, s az abból fakadó determinisztikus eltéréseket is kiiktatja. Mentessíti a sokváltozós elemzéseket a determinisztikus hibák elemzésre gyakorolt hatásaitól. Az SNV korrekciót a 7 képlet definiálja.

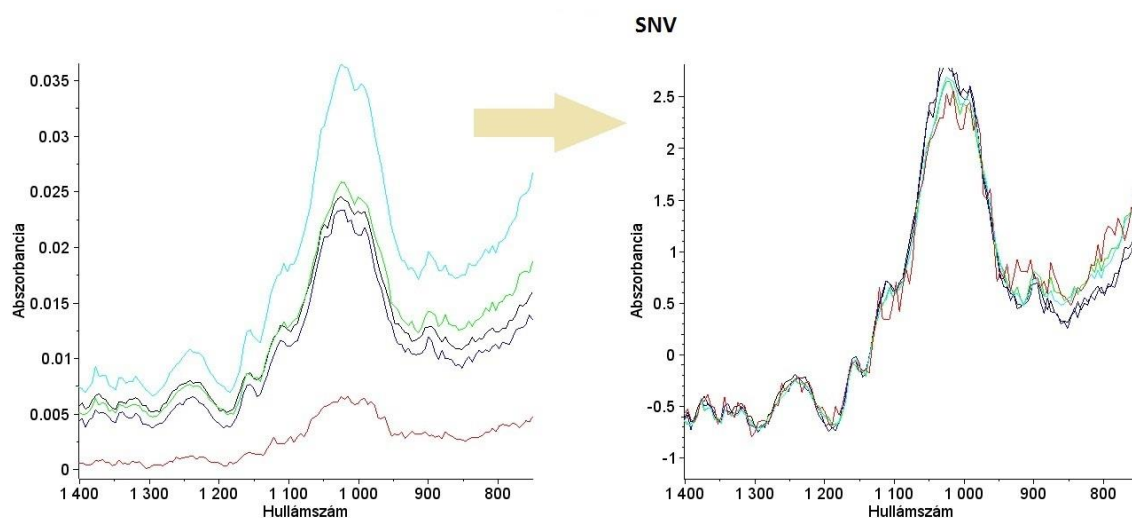
$$(7) \quad \widetilde{x}_{i,j} = \frac{x_{i,j} - m_i}{s_i},$$

ahol m_i a sorok (fafaj) szerinti átlagérték, és

$$(7.1) \quad m_i = \frac{1}{J} \sum_{j=1}^J x_{i,j}$$

$$(7.2) \quad s_i = \sqrt{\frac{1}{J-1} \sum_{j=1}^J (x_{i,j} - m_i)^2},$$

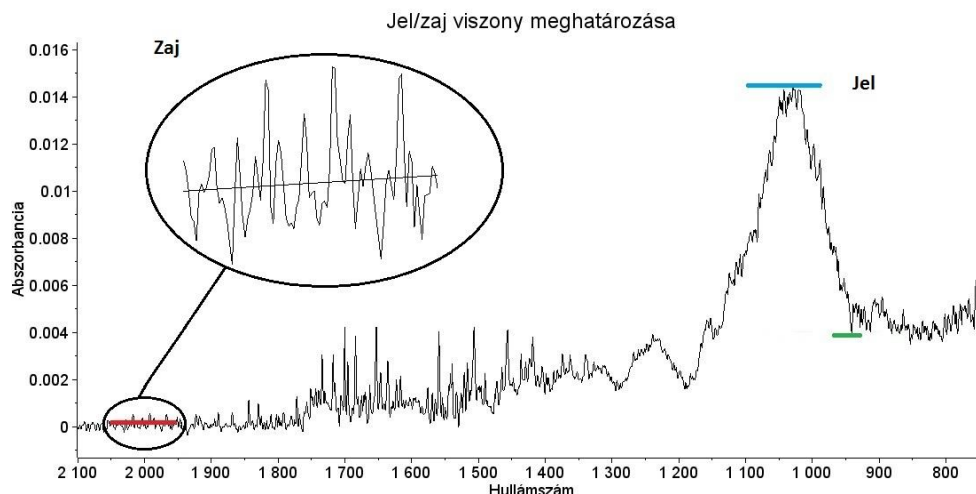
ahol s_i a sorok szerinti korrigált szórás



13. ábra: Spektrumok SNV transzformációja

6. Jel/zaj viszonyt befolyásoló paraméterek

Minél magasabb a jel/zaj viszony, annál tisztábbak és jobban értékelhetőek a mért spektrumok. A zaj mértéke a műszerre jellemző, ezért célunk, hogy a jelerősséget növeljük. Ehhez ismernünk kell a jel/zaj viszonyt befolyásoló tényezőket. A spektrumok jel/zaj értékének meghatározásához a jelösszetevőt 1025 cm^{-1} hullámszámnál jelentkező intenzitás maximumnak és a 950 cm^{-1} -nél lévő intenzitás minimumnak a különbségeként definiáltuk. A zajamplitúdót a $1975 - 2025\text{ cm}^{-1}$ tartományban, alapjel-korrekción követően a jel-fluktuáció szórásával jellemeztük. A jel/zaj viszony értékek származtatását vizualizálja a 14. ábra.



14. ábra: Jel/zaj viszony szemléltetése

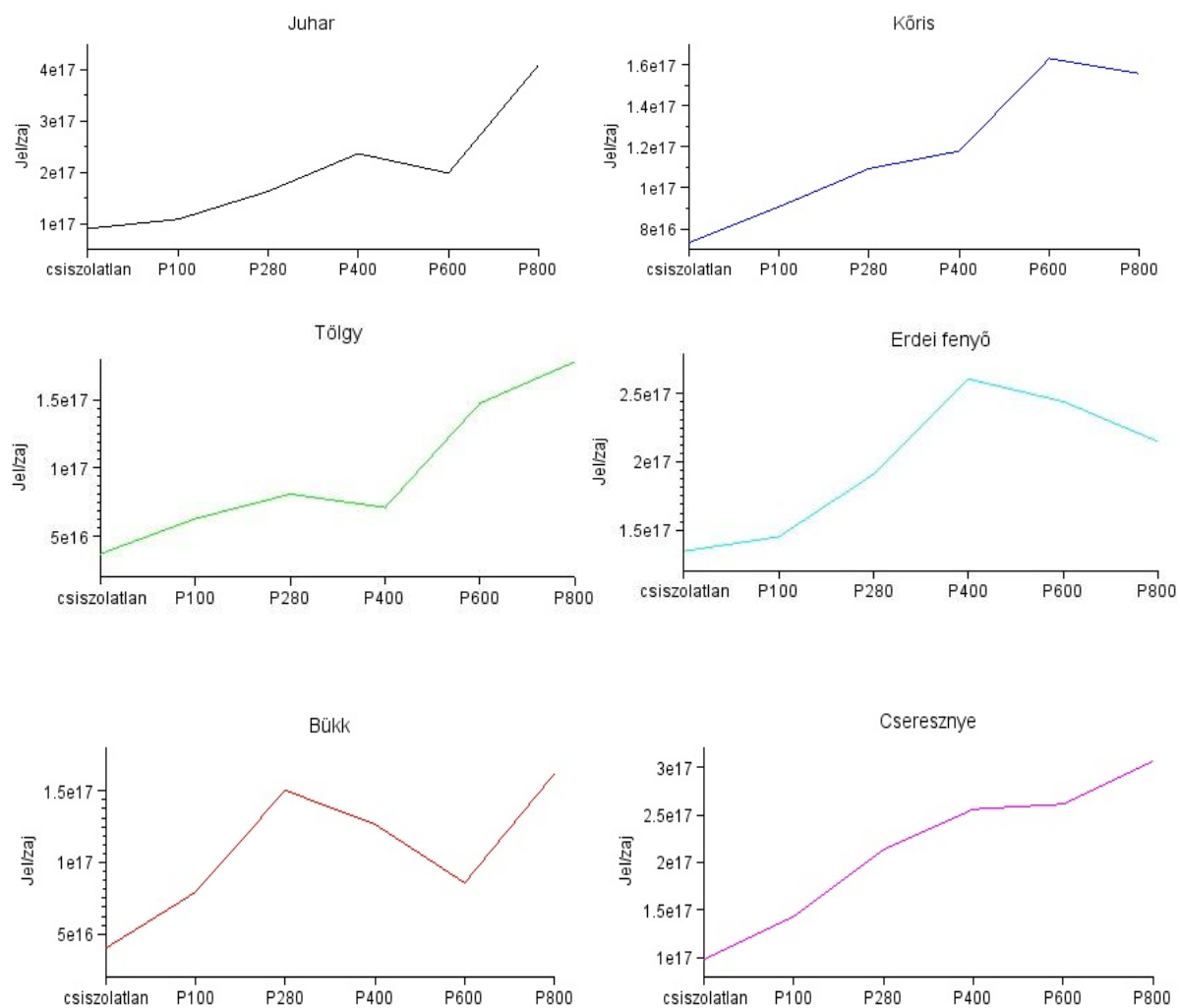
Minden spektrum esetén meghatároztuk a maximális abszorbanciájú elnyelést, illetve az elnyelési sáv lefutását követő minimum értéket, amit a 14. ábrán kék, illetve zöld színnel jelöltünk. A két érték különbségéből adódott a jel nagysága. A zaj mértékének meghatározásához a spektrum egy determinisztikus jelmentes szakaszára egyenest illesztettünk, ez a 14. ábrán a kiemelt nézetben látható. Az illesztés szakaszán a spektrum által felvett értékek és az egyenes különbségéből adódott a zaj mértéke.



15. ábra: Jel/zaj viszony a felületi érdesség függvényében

Megvizsgáltuk, hogy a spektrométer kristályának lefedettsége milyen hatással van a jelerősségre. A kristályt milliméter pontossággal hat részre osztottuk, majd egy papírlappal egyre nagyobb részeket fedtünk le, amíg el nem értük a teljes lefedettséget. A lefedettség vizsgálathoz homogén és konstans érdességű fénymásolópapírt használtunk. A felfekvés vizsgálatban modell mintaként a papírra azért esett a választás, mert IR spektruma a

faanyagéhoz nagyon hasonló. A 15. ábrán látható, hogy a jel/zaj viszony arányos a lefedettség mértékével. Így igazolható, hogy a furnérok felfekvése hatással van a spektrumok minőségére, hiszen, ha a felfekvés nem tökéletes, akkor csak kisebb felület érintkezik csak a kristállyal. A nem megfelelő leszorítás vagy a minta hullámossága csökkentik a spektrum értékelhetőségét. Feltételeztük, hogy a furnérok felületi érdessége zavaróan hat, mivel az apró egyenetlenségek miatt nem biztosított a kívánt felfekvés, ezért a felületüket különböző érdességű (P100, P280, P400, P600, P800) csiszolópapírokkal csiszoltuk meg, és mindegyik csiszolás után 3 párhuzamos FT-IR felvételt készítettünk, melyeket átlagoltunk. Minden egyes csiszolás után ecsettel a felületet portalanítottuk. Portalanítás nélkül igen változó lett a minták felfekvése. Feltételezhető, hogy a porszemcsék részlegesen távol tartják a felületet az egykristálytól és az infravörös fény kisebb felületen érintkezik az egykristállyal.

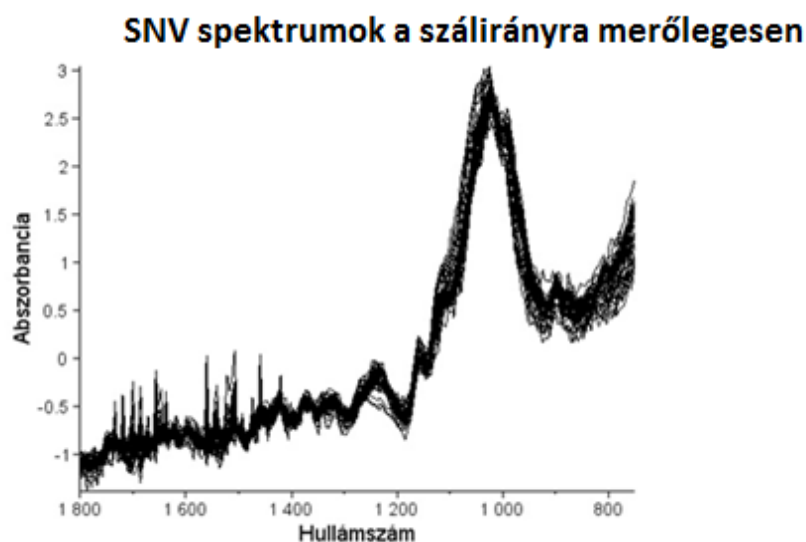


16. ábra: Jel/zaj viszony változása a faanyag típus és a felületi érdesség függvényében

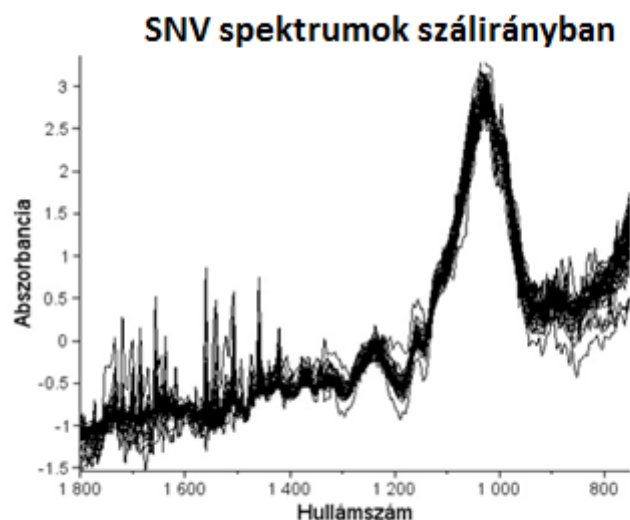
A felületi érdességet csiszolással növelve, mind a 6 fafajnál jelentős növekedés látható a jel/zaj viszonyban. Finomabb csiszolópapír használata tovább javít a spektrum minőségén. A növekvő tendencia néhány helyen megtörik, de még így is egyértelműen jobb minőséget kapunk, mint csiszolatlan, csak gyalult felületű mintáknál. A visszaugrások valószínűleg a kézi csiszolás pontatlanságaiból és/vagy a felfekvési egyenetlenségből származtak.

7. Faanyag FT-IR spektrumainak PCA elemzése

A faanyagminták szűkített tartományú, 5 cm^{-1} felbontású SNV spektrumait Excel munkalapon táblázatba, inputmátrixba rendeztük. A szálirányban, illetve szálirányra merőlegesen származtatott inputmátrixok SNV spektrumait szemléltetik az 17-18. ábrák.



17. ábra: Az ATR feltétellel szálirányra merőlegesen származtatott SNV faanyag spektrumok (a primér spektruomakat lásd a melléklet CD-én, Excel fájlban)



18. ábra: Az ATR feltétellel szálirányban származtatott SNV faanyag spektrumok (a primér spektrumokat lásd a melléklet CD-én, Excel fájlban)

Az 17.-18. ábrákon szemléltetett SNV spektrumok halmazának főkomponens elemzéseit, oszlopok szerint centrált inputmátrixokra a Scilab 5.1 szoftvert *svd* (*singular value decomposition*) parancsával hajtottuk végre. A PCA „score” (T) és „loading” (P) mátrixainak előállításait a 8.2 és 8.3 egyenletek mutatják. A szinguláris érték-felbontás definíciós képletét szemlélteti az 8. egyenlet.

$$(8) D_c = USV^T$$

Az **svd** parancssal, Scilab algoritmus (lásd. a mellékletben) részeként a *szinguláris érték felbontás* következőképpen valósítható meg:

$$(8.1) [U, S, V] = svd(D_c)$$

$$(8.2) T = US$$

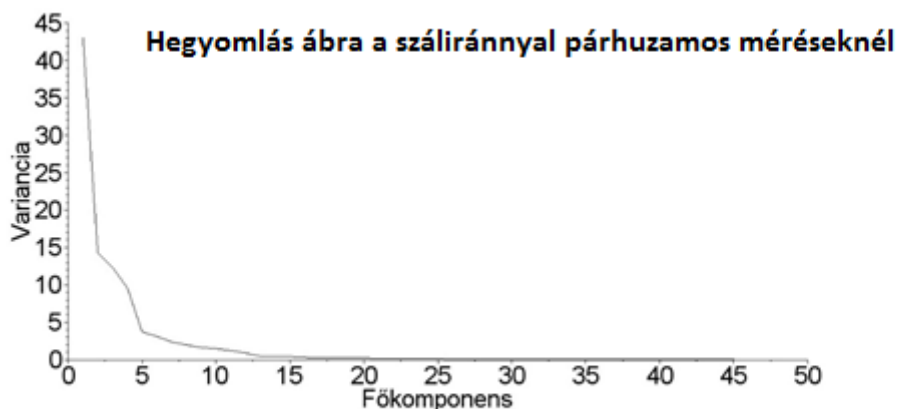
$$(8.3) P = V$$

A score (T) mátrix főkomponenseinek sajátértékeit az oszlopok négyzetösszegeiből származtatjuk. A saját értékeket %-ban kifejezve kapjuk meg a főkomponensek által magyarázott részvarianciákat. A főkomponensek egymást követő sorrendjében ábrázolva a sajátértékeket vagy a magyarázott variancia tagokat megkapjuk a PCA felbontásnak a hegyomlás ábráit (19-es és 20-as ábrák). A hegyomlás ábra alapján meghatározhatjuk a domináns, az adathalmaz varianciájának döntő részét szolgáltatató főkomponensek számát.

Szálirányra merőlegesen az első 4, és szálirányban az első 5 főkomponens adja a teljes variancia több mint 80 %-át (83,48 %, illetve 82,95 %; lásd a IV és V. táblázatokat). A domináns főkomponensek alkotta „score” mátrixok – leszűkített oszlopszámú T mátrixok – adatait és a magyarázott varianciaértékeiket a IV-V. táblázatok tartalmazzák.



19. ábra: Hegyomlás ábra a szálirányra merőleges mérésekre



20. ábra: Hegyomlás ábra a szálirányú mérésekre

IV. táblázat: PCA felbontás főkomponenseinek score-jai, a hegyomlás ábra alapján T mátrix szűkítése szálirányra merőleges mérésekre

	t ₁	t ₂	t ₃	t ₄
Juhar 1	-0,1513	-1,2308	0,4478	0,1472
Juhar 2	-0,1337	-1,8111	0,3982	0,2331
Juhar 3	-1,2348	-0,4144	-0,2109	0,2455
Juhar 4	-1,2297	-0,7238	-0,0839	0,3245
Juhar 5	-1,6971	0,0153	-0,2468	0,1065
Juhar 6	-0,5366	0,0724	-0,0012	0,1897
Juhar 7	0,0364	0,2476	0,3495	-0,0684
Juhar 8	0,4545	0,1297	-0,3761	0,1866
Juhar 9	0,8644	0,2041	0,121	0,0414
Juhar 10	-0,0282	0,6988	-0,2513	0,1874
Juhar 11	-0,0441	0,8249	-0,1562	0,0689
Kőris 1	-0,1478	0,2032	1,1184	-0,2547
Kőris 2	0,5057	0,1613	1,5347	-0,318
Kőris 3	-1,2858	0,6282	0,0907	-0,0424
Kőris 4	-1,3167	0,5958	0,2156	0,0575
Kőris 5	-0,3276	0,4138	0,1126	-0,0253
Kőris 6	0,3534	0,528	0,3262	-0,0939
Kőris 7	0,7945	0,1634	0,8129	-0,1282
Tölgy 1	-0,7072	-0,5277	-0,4002	0,5906
Tölgy 2	0,372	-1,0258	0,2865	0,5716
Tölgy 3	-1,5684	0,8123	-0,0117	0,2182
Tölgy 4	-1,2972	0,2041	0,1468	0,295
Tölgy 5	-0,6494	0,5006	0,2611	0,0033
Tölgy 6	-0,8218	0,6973	0,542	-0,2283
Tölgy 7	-0,6648	0,6256	-0,2286	0,3517
Tölgy 8	-1,4495	0,9433	-1,0222	0,7981
Erdei 1	-1,1839	-0,555	-0,678	-0,6351
Erdei 2	-1,4021	-1,4754	-0,981	-0,3279
Erdei 3	-1,9699	-2,1043	-0,9711	-0,2943

IV. táblázat (folytatás)

	t ₁	t ₂	t ₃	t ₄
Erdei 5	-0,8904	0,2106	-0,434	-0,812
Erdei 6	-0,5103	0,3444	-0,2648	-0,8197
Erdei 7	-0,285	0,5077	-0,2525	-0,7878
Erdei 8	0,2407	0,6484	-1,1163	-0,5931
Erdei 9	1,3236	0,2528	-1,011	-0,5412
Bükk 1	0,4128	0,444	-0,3927	0,3919
Bükk 2	0,6311	0,1045	-0,0698	0,2749
Bükk 3	0,1799	0,0063	-0,1554	0,4246
Bükk 4	-0,6454	0,5536	0,3376	0,2992
Bükk 5	-0,6013	0,4263	0,5215	0,3026
Bükk 6	-0,0264	-0,1934	0,3857	0,3036
Bükk 7	0,1029	0,045	0,5436	0,2601
Bükk 8	-0,0241	-0,5399	1,2795	-0,2579
Bükk 9	-0,0208	-0,8019	1,5571	-0,2442
Cseresznye 1	3,1815	-0,4357	-0,1807	0,0006
Cseresznye 2	3,8098	-0,1746	-0,2623	-0,1101
Cseresznye 3	1,7049	-0,0304	-0,9676	0,5887
Cseresznye 4	2,6459	-0,2464	-0,2818	0,0077
Cseresznye 5	3,209	0,0781	-0,309	0,0301
Cseresznye 6	2,3624	-0,1446	-0,0559	-0,0148
Variancia (%)	52,8693	14,1035	11,7262	4,7787
Szórás	1,2958	0,6692	0,6102	0,3896

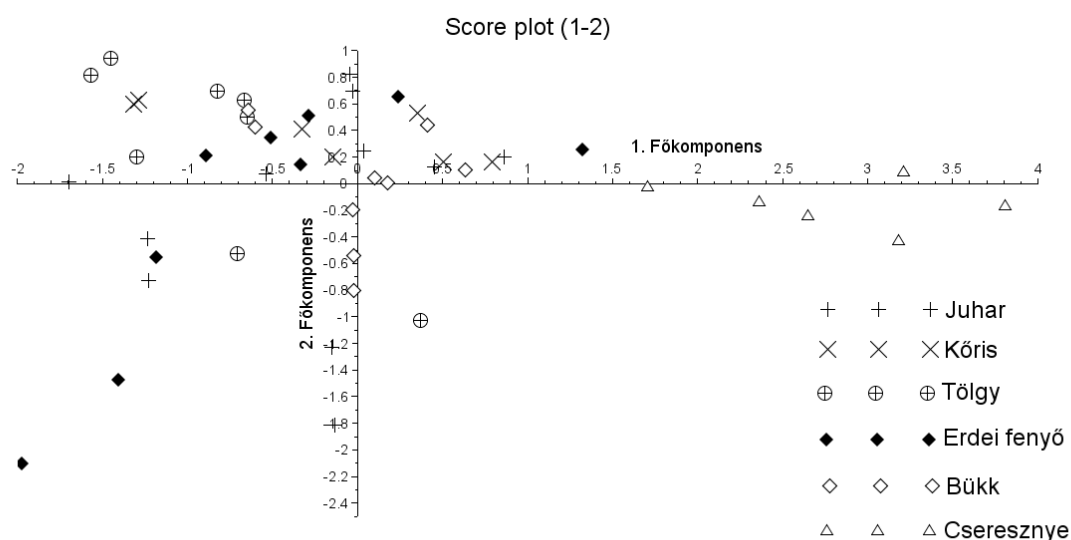
V. táblázat: PCA felbontás főkomponenseinek score-jai, a hegyomlás ábra alapján T mátrix szűkítése szádirányú mérésekre

	t ₁	t ₂	t ₃	t ₄	t ₅
Juhar 1	-0,039	-0,7888	-0,1751	-0,1545	-0,1185
Juhar 2	0,2043	-0,633	-0,0654	0,2167	-0,1727
Juhar 3	-0,1104	-0,206	-0,4978	0,4051	-0,1635
Juhar 4	0,3049	-0,5588	0,1285	0,3635	-0,2204
Juhar 5	-1,789	-0,4793	-0,9509	-0,2786	0,0857
Juhar 6	-1,6197	-0,5069	-0,8406	-0,0025	-0,086
Juhar 7	-0,4132	-0,7449	-0,6612	-0,0548	-0,0599
Juhar 8	-5,8747	-0,9844	1,046	-0,9224	0,5032
Kőris 1	1,2629	-1,1903	0,5988	-0,3886	-0,0996
Kőris 2	1,2354	-1,015	0,341	-0,368	-0,0798

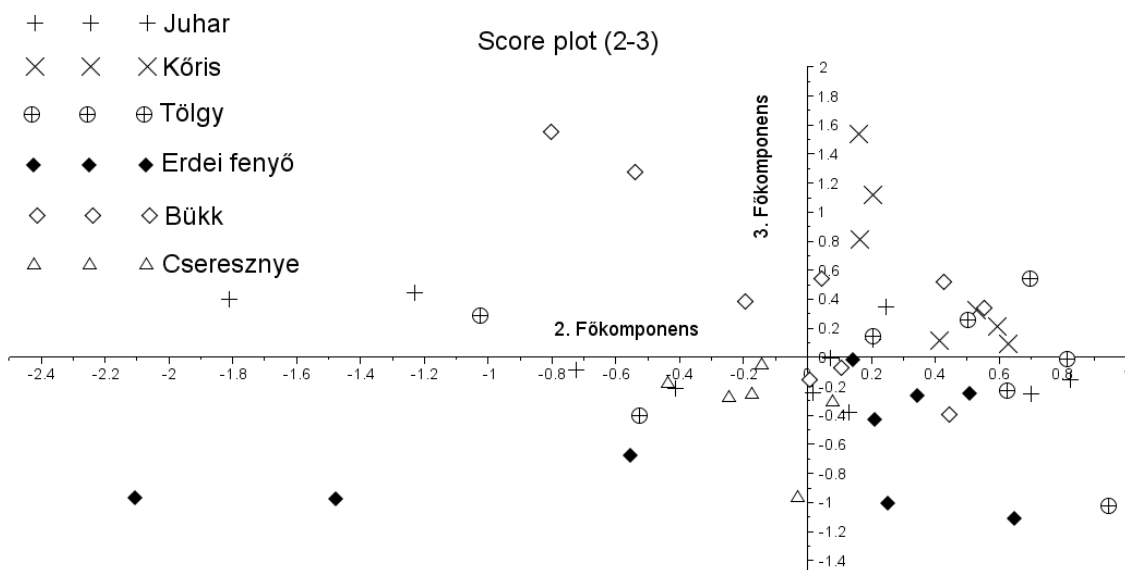
V. táblázat (folytatás)

	t ₁	t ₂	t ₃	t ₄	t ₅
Kóris 4	1,0903	-0,9987	0,4049	-0,2243	-0,0874
Kóris 5	0,3514	-0,6917	0,7736	-0,6563	0,0927
Kóris 6	-2,0036	0,8732	1,3891	0,7265	-0,3024
Kóris 7	1,5013	-0,4083	-0,07	0,4315	-0,2351
Kóris 8	0,3699	-0,1267	0,1296	0,4889	-0,1793
Tölgy 1	1,1392	0,7745	0,0169	-0,8055	0,0051
Tölgy 2	0,7478	-0,1044	0,2618	-1,024	0,2537
Tölgy 3	0,0613	1,4526	-0,1691	-0,9412	-0,2982
Tölgy 4	1,6857	1,6513	-0,2207	-1,0408	-0,2186
Tölgy 5	-0,8976	1,9192	-1,0208	-2,0889	0,1417
Tölgy 6	0,7918	2,1367	2,4709	1,1235	0,8314
Tölgy 7	1,4049	1,24	-0,6077	-0,2296	-0,4998
Tölgy 8	1,1882	-0,5711	-0,1837	-0,0176	-0,0338
Erdei fenyő 1	1,053	-0,6351	-0,383	-0,1633	0,5879
Erdei fenyő 2	1,2034	-0,5309	-0,3023	0,0742	0,6504
Erdei fenyő 3	0,1983	0,2296	-0,465	0,743	0,5965
Erdei fenyő 4	0,2792	0,0226	-0,1137	0,2961	0,7615
Erdei fenyő 5	0,0497	0,8132	-1,1639	0,632	0,4643
Erdei fenyő 6	0,834	-0,1511	-0,4278	-0,0968	0,8276
Erdei fenyő 7	-0,1362	0,1977	-0,6997	0,5252	0,7197
Erdei fenyő 8	0,5457	-0,1263	-0,2402	0,4744	0,8214
Bükk 1	0,6856	-0,1725	0,4735	-0,0253	-0,2655
Bükk 2	0,4957	-0,1288	1,2324	-0,7237	-0,1791
Bükk 3	0,7927	-0,5489	0,7566	-0,3583	-0,3074
Bükk 4	-0,2216	0,1092	0,3986	0,2331	-0,3142
Bükk 5	0,7421	-0,0996	0,7617	0,1095	-0,3713
Bükk 6	0,2106	0,0825	0,5988	0,4519	-0,448
Bükk 7	-0,5171	-0,09	0,1904	0,1753	-0,4636
Bükk 8	0,1579	0,2462	0,0693	0,5959	-0,5052
Cseresznye 1	-0,5715	-0,1928	-0,8117	0,3803	-0,2581
Cseresznye 2	-1,4693	0,19	-1,2524	0,8295	-0,3366
Cseresznye 3	-0,8754	0,3763	-0,674	0,9687	-0,4205
Cseresznye 4	-3,5164	0,58	0,6023	-0,1832	0,0008
Cseresznye 5	-0,5022	0,3467	-0,773	-0,0372	-0,3491
Cseresznye 6	-0,6424	0,5029	-0,0698	1,1173	-0,2949
Variancia (%)	43,0086	14,2886	12,3502	9,5855	3,7196
Szórás	1,3633	0,7858	0,7306	0,6436	0,4009

A IV-V. táblázatokban feltüntetett főkomponensek (oszlopok) korreláltatása adja a „score plot” ábrákat. Az első két és a második-harmadik főkomponensek score plot-jait szemléltetik a 21. és a 22. ábrák. Ezeken a „score plot” ábrákon az egyes faanyag típusok furnér mintáit különböző jelölések emelik ki.



21. ábra: Score plot, 1. és 2. főkomponenssel



22. ábra: Score plot, 2. és 3. főkomponenssel

Már a kétdimenziós, viszonylag kis magyarázott varianciájú „score plot” ábrákon is megfigyelhető a különböző furnér mintáknak a síkbeli elkülönülése. A domináns főkomponensek, négy-, ill. ötdimenziós térben, figyelembe véve az azonos típusú furnér minták térbeli pozíciójában jelentkező korrelációs viszonyokat a kétdimenziós „score plot” ábrákon jelentkező csoportosulásoknál sokkal jobb csoport elkülönülések kaphatók. A csoportokon belüli korrelációkat kovariancia mátrixokkal jellemezve előállíthatóak a furnér objektumok csoport-középpontjaiktól mért Mahalanobisi távolságai, amelynek bázisán az egyes objektumok csoportosulásai a többdimenziós terekben egyértelműbben jellemezhetők, ill. értékelhetők. A következő fejezet az SNV spektrumokkal jellemzett furnér objektumokra bemutatja a furnér csoportjainak megkülönböztethetőségének értékelését.

7.1 Faanyag típusokhoz tartozás jellemzése Mahalanobisi távolságok és Wilks-lambda értékek alapján

A fuzzy (c-közép) csoportosítás funkcióját kölcsönözve, olyan egyedi megoldást alkalmaztunk a furnér csoportjaink elkülönülésének értékelésénél, amelyben a kiindulási csoportok középpontja az értékelés során rögzített pozíciójú marad. Ezzel a megoldással a teljes furnér adathalmazon belül az egyes furnér típusok (osztályok) egymáshoz viszonyított, többdimenziós térbeli elhelyezkedéséről kapunk képet a fuzzy elemzés csoportokba való tartozási valószínűségeinek kiszámítása alapján.

Első lépésben fix magpontokat adtunk meg, úgy, hogy képeztük az egyes fafajok főkomponensenkénti középértékeit. Ezután meghatároztuk az összes osztály kovariancia mátrixát. Mahalanobisi-távolságok alapján kiszámoltuk a fuzzy súlyértékeket minden egyes objektumra. Ezáltal megkapjuk az objektumok egyes osztályokhoz tartozási valószínűségét. Ha összeadjuk egy objektum osztályonkénti súlyértékeit, akkor szükségesen 1-et kapunk, ami azt fejezi ki, hogy az adott objektum (furnér) biztosan valamelyik csoporthoz tartozó. Az objektumnak adott csoporthoz kapott súlyértéke az adott csoporthoz tartozásnak a valószínűsége. A súlyértékek ideális esetben a saját osztályukba sorolják be az objektumokat, maximális, tehát 1-es valószínűséggel. Az ismertetett eljárást algoritmizálását és futtatását egy, saját készítésű Scilab algoritmussal valósítottuk meg. A szádirányú és szádirányra merőleges SNV spektrumok inputmátrixaira kapott értékelések eredményeit a VI-VII. táblázatok tartalmazzák.

VI. táblázat: Osztályhoz tartozási valószínűségek szálirányra merőleges méréseknél

Szálirányra merőleges	1. csoport	2. csoport	3. csoport	4. csoport	5. csoport	6. csoport
Juhar 1	0,966	0	0,032	0	0,002	0,001
Juhar 2	0,972	0	0,026	0	0,001	0,001
Juhar 3	0,993	0	0,007	0	0	0
Juhar4	0,968	0	0,03	0	0	0,002
Juhar 5	0,936	0,007	0,056	0	0,001	0,001
Juhar 6	0,658	0,002	0,337	0	0,003	0,001
Juhar 7	0,418	0,355	0,184	0	0,04	0,003
Juhar 8	0,808	0,023	0,037	0	0,116	0,016
Juhar 9	0,919	0,035	0,011	0	0,029	0,007
Juhar 10	0,891	0,027	0,052	0	0,028	0,002
Juhar 11	0,975	0,009	0,012	0	0,003	0
Kőris 1	0,005	0,892	0,082	0	0,021	0
Kőris 2	0,003	0,979	0,015	0	0,003	0
Kőris 3	0,076	0,692	0,231	0	0,001	0
Kőris 4	0,013	0,1	0,886	0	0,001	0
Kőris 5	0,366	0,564	0,066	0	0,003	0
Kőris 6	0,36	0,562	0,056	0	0,019	0,002
Kőris 7	0,042	0,911	0,037	0	0,009	0,001
Tölgy 1	0,046	0	0,929	0	0,003	0,021
Tölgy 2	0,01	0	0,974	0	0,015	0,001
Tölgy 3	0,009	0,007	0,983	0	0,001	0
Tölgy 4	0,014	0,003	0,979	0	0,003	0,002
Tölgy 5	0,019	0,601	0,379	0	0,001	0
Tölgy 6	0,019	0,033	0,945	0	0,003	0
Tölgy 7	0,009	0,002	0,98	0	0,008	0,001
Tölgy 8	0,003	0,001	0,991	0	0,003	0,002
Erdei fenyő 1	0	0	0	1	0	0
Erdei fenyő 2	0	0	0	1	0	0
Erdei fenyő 3	0	0	0	1	0	0
Erdei fenyő 4	0	0	0,001	0,999	0	0
Erdei fenyő 5	0	0	0	1	0	0
Erdei fenyő 6	0	0	0	1	0	0
Erdei fenyő 7	0	0	0,001	0,999	0	0
Erdei fenyő 8	0	0	0	0,999	0	0

VI. táblázat (folytatás)

Szállírányra merőleges	1. csoport	2. csoport	3. csoport	4. csoport	5. csoport	6. csoport
Bükk 1	0,034	0,003	0,029	0	0,923	0,011
Bükk 2	0,109	0,003	0,031	0	0,848	0,01
Bükk 3	0,025	0,001	0,269	0	0,696	0,009
Bükk 4	0,004	0,003	0,101	0	0,891	0,001
Bükk 5	0,002	0,001	0,024	0	0,973	0
Bükk 6	0,007	0	0,333	0	0,66	0,001
Bükk 7	0,01	0,003	0,139	0	0,846	0,001
Bükk 8	0,012	0,002	0,219	0	0,766	0,001
Bükk 9	0,005	0,001	0,054	0	0,94	0
Cseresznye 1	0,004	0,001	0,001	0	0,001	0,992
Cseresznye 2	0,001	0,001	0	0	0	0,998
Cseresznye 3	0,006	0,001	0,003	0	0,037	0,953
Cseresznye 4	0,004	0,001	0,001	0	0,002	0,992
Cseresznye 5	0,003	0,003	0	0	0	0,992
Cseresznye 6	0,011	0,003	0,001	0	0,002	0,982

Szállírányra merőlegesen zömében 90 %-os saját osztályhoz tartozó valószínűségeket kaptunk. Az eljárás szerint két minta nem megfelelő osztályban volt, illetve még 3 esetben kaptunk 40 % és 60 % közötti értékeket. Ebben a 3 esetben juhar és kőris fafajok közötti különbségek voltak alacsonyak.

VII. táblázat: Osztályhoz tartozási valószínűségek szállírány méréseknél

Szállírány	1. csoport	2. csoport	3. csoport	4. csoport	5. csoport	6. csoport
Juhar 1	0,816	0,021	0,126	0,008	0,018	0,01
Juhar 2	0,97	0,005	0,013	0,006	0,005	0,001
Juhar 3	0,653	0,015	0,036	0,06	0,035	0,2
Juhar 4	0,826	0,038	0,052	0,056	0,023	0,005
Juhar 5	0,901	0,001	0,011	0	0,002	0,084
Juhar 6	0,918	0,001	0,009	0	0,004	0,068
Juhar 7	0,957	0,002	0,023	0,001	0,004	0,013
Juhar 8	0,993	0	0,003	0	0	0,004
Kőris 1	0,011	0,765	0,156	0,059	0,009	0,001

VII. táblázat (folytatás)

Szálirány	1. csoport	2. csoport	3. csoport	4. csoport	5. csoport	6. csoport
Kőris 3	0,012	0,614	0,336	0,019	0,016	0,003
Kőris 4	0,004	0,92	0,051	0,022	0,003	0
Kőris 6	0,001	0,788	0,029	0,001	0,002	0,179
Kőris 7	0,174	0,479	0,3	0,022	0,015	0,01
Kőris 8	0,012	0,527	0,039	0,081	0,328	0,012
Tölgy 1	0	0	1	0	0	0
Tölgy 2	0	0,002	0,98	0,002	0,003	0,013
Tölgy 3	0	0	1	0	0	0
Tölgy 4	0	0	0,998	0	0	0,002
Tölgy 5	0	0	0,999	0	0	0,001
Tölgy 6	0	0	0,995	0	0,001	0,004
Tölgy 7	0	0	0,994	0,001	0	0,005
Tölgy 8	0,008	0,11	0,189	0,687	0,003	0,003
Erdei fenyő 1	0,013	0,053	0,312	0,612	0,003	0,007
Erdei fenyő 2	0,03	0,125	0,224	0,61	0,004	0,007
Erdei fenyő 3	0,007	0,013	0,01	0,602	0,011	0,359
Erdei fenyő 4	0,006	0,097	0,133	0,56	0,082	0,123
Erdei fenyő 5	0,003	0,004	0,03	0,859	0,002	0,103
Erdei fenyő 6	0,001	0,007	0,308	0,649	0,002	0,033
Erdei fenyő 7	0,003	0,002	0,004	0,074	0,002	0,915
Erdei fenyő 8	0,017	0,043	0,022	0,886	0,014	0,018
Bükk 1	0	0,031	0,369	0,005	0,591	0,004
Bükk 2	0	0,007	0,306	0,001	0,675	0,01
Bükk 3	0,001	0,137	0,361	0,008	0,49	0,003
Bükk 4	0	0,082	0,02	0,002	0,886	0,011
Bükk 5	0	0,013	0,276	0,001	0,707	0,002
Bükk 6	0,002	0,562	0,102	0,005	0,315	0,014
Bükk 7	0,011	0,15	0,078	0,012	0,66	0,09
Bükk 8	0,004	0,199	0,062	0,069	0,517	0,149
Cseresznye 1	0,482	0,002	0,012	0,005	0,008	0,491
Cseresznye 2	0,01	0,001	0,003	0,001	0,007	0,977
Cseresznye 3	0,001	0	0	0,002	0,004	0,993
Cseresznye 4	0,001	0,004	0,007	0	0,002	0,987
Cseresznye 5	0,001	0,003	0,059	0,018	0,002	0,916
Cseresznye 6	0,004	0,031	0,008	0,041	0,122	0,794

Szálirányban is hasonló értékeket kaptunk. Itt 3 esetben nem a saját osztályukba lettek az objektumok besorolva. Szálirányra merőleges mérésekhez képest többször kaptunk alacsonyabb osztályhoz tartozási valószínűséget. 8 esetben kaptunk 40 % és 60% közötti

értéket és kevesebb a 90 % fölötti valószínűség is. A saját csoportokba tartozás valószínűségeinek átlagértékeit a VIII. táblázat tartalmazza.

VIII. táblázat: Osztályhoz tartozási valószínűségek átlagértékei

	Szálirányra merőleges Átlag	Szálirány Átlag
Juhar	0,864	0,879
Kőris	0,671	0,703
Tölgy	0,895	0,894
Erdei fenyő	0,75	0,607
Bükk	0,999	0,605
Cseresznye	0,985	0,86

A megfelelő szálirányú, illetve szálirányra merőleges főkomponens koordinátáknak - a két T mátrix megfelelő oszlopainak - szórásElemzését F-próbával hajtottuk végre. A szórásElemzéssel a célunk az volt, hogy megállapítsuk van-e statisztikailag értékelhető különbség a szálirányban, illetve szálirányra merőlegesen felvett mérések között. Nevezetesen, arról kívántunk ily módon képet kapni, hogy a totálreflexiós egykristály érzékeny-e a faanyag szöveti eltéréséből származói inhomogenitásra, ill. annak esetleges anizotrópiájára. Az összetartozó főkomponensek F-valószínűségi változó értékeit $\alpha < 0.05$ valószínűségi szintre vonatkoztatva tartalmazza a IX. táblázat.

IX. táblázat: Varianciahányadosok a szálirányú, illetve szálirányra merőleges mérések között

$\alpha < 0.05$	t ₁	t ₂	t ₃	t ₄
Juhar	2,671 (3,438)	0,292 (3,438)	2,237 (3,438)	3,917 (3,438)
Kőris	1,332 (3,501)	3,331 (3,501)	0,809 (3,501)	4,063 (3,501)
Tölgy	1,347 (3,438)	1,380 (3,438)	2,122 (3,438)	2,821 (3,438)
Erdei	1,989 (3,179)	2,094 (3,179)	1,237 (3,179)	1,557 (3,179)
Bükk	1,144 (3,179)	1,912 (3,179)	1,747 (3,179)	1,656 (3,179)
Cseresznye	1,564 (4,284)	1,559 (4,284)	2,061 (4,284)	2,157 (4,284)

(A zárójelben közölt adatok az összehasonlítás F_{krit} értékei)

A varianciahányadosok nem mutattak szignifikáns eltérést, ezért a kiindulási hipotézist, hogy a szálirányban, illetve szálirányra merőlegesen felvett IR-spektrumok között szignifikáns eltérés lehet, elvetettük. Egyedül a juhar t_4 főkomponenseinek összevetésénél adódott szignifikáns eltérés.

A csoportokba tartozási valószínűségek alapján a szálirányra merőleges IR-spektrumok értékelése kedvezőbb csoportosulást sugall, de ezt az F-próba eredménye nem támasztja alá.

A csoportba tartozási valószínűségek mellett a csoport-középpontok egymáshoz való közelségeit a főkomponensek terében a páronkénti osztály specifikus Wilks-lambda értékekkel jellemeztük (9.1. összefüggés). Abban az esetben, ha a Wilks-lambda értékek 1-hez közeledek, akkor az osztályok centrumai egymáshoz közel helyezkednek el, ha az értékeik zérus-hoz közeledek, akkor a furnér csoportok középpontjai egymástól távoliak.

$$(9.1) \quad \text{osztály specifikus Wilks' } \lambda = \frac{\sum_i \sum_j (x_{i,j} - \bar{x}_i)^2}{\sum_k \sum_j (x_{i,j} - \bar{x}_k)^2}, \text{ ahol}$$

$x_{i,j}$ az i -edik osztály j -edik eleme és $\bar{x}_i$, $\bar{x}_k$ i -edik, illetve k -edik osztály centruma

A csoportpáronkénti Wilks-lambda értékeket a X-XI. táblázatok tartalmazzák. A táblázatokban, oszloponként az adott furnér mintáinak (objektumainak) a saját centrumoknak a különböző centrumokhoz viszonyított Wilks-lambda értékei találhatók.

X. táblázat: osztály specifikus Wilks-lambda értékek szálirányra merőleges mérésekre

Szálirányra merőleges	Juhar	Kőris	Tölgy	Erdei fenyő	Bükk	Cseresznye
Juhar centrum	1	0,0408	0,2876	0,0048	0,0807	0,0625
Kőris centrum	0,2133	1	0,4698	0,0047	0,1758	0,0375
Tölgy centrum	0,1708	0,0619	1	0,0031	0,0958	0,0534
Erdei fenyő centrum	0,0104	0,0066	0,0140	1	0,0075	0,0029
Bükk centrum	0,1478	0,0600	0,4370	0,0033	1	0,0377
Cseresznye centrum	0,0725	0,0450	0,0272	0,0083	0,0380	1

XI. táblázat: osztály specifikus Wilks-lambda értékek szádirányú mérésekre

Szádirány	Juhar	Kőris	Tölgy	Erdei fenyő	Bükk	Cseresznye
Juhar centrum	1	0,0489	0,1333	0,0299	0,0932	0,1271
Kőris centrum	0,1093	1	0,4129	0,1898	0,3145	0,0717
Tölgy centrum	0,0044	0,0129	1	0,0218	0,0166	0,0766
Erdei fenyő centrum	0,1126	0,1594	0,2526	1	0,0957	0,3165
Bükk centrum	0,0400	0,3674	0,4372	0,1007	1	0,1260
Cseresznye centrum	0,1025	0,0649	0,0953	0,0702	0,1563	1

A táblázatok adataiból megállapítható, hogy az összes Wilks-lambda érték 0.5 alatti. A legnagyobb értékűek a tölgy-kőris és a tölgy-bükk összevetéseknél jelentkeznek, ami azt jelenti, hogy ezeknek a csoportoknak a középpontjai vannak a főkomponenstérben a legközelebb egymáshoz. Mindenek ellenére a csoportok objektumainak sajátcsoportjaikba tartozási valószínűségei magas értékűek (lásd. X-XI. táblázatok), ami jelzi, hogy a tölgy-kőris és tölgy-bükk csoportok a tulajdonságtérben viszonylag jól elkülönülnek egymástól. Az X-XI. táblázatok adatainak értékeléséből a következő tanulságok adódnak:

- Tölgy objektumai bizonyos mértékben átfednek a kőris osztállyal.
- Tölgy objektumai bizonyos mértékben átfednek a bükk osztállyal.
- Mindkét esetben a tölgy osztály foglalja magába a másik osztály bizonyos részét

Ezek a megállapítások a súlyértékeknél is visszaköszönnek. A 2 hibásan besorolt objektum, kőris és tölgy fafaj helyet cseréltek egymással. Bükk osztály esetén a tölgy osztályhoz viszonyított súlyértékek a legmagasabbak a saját osztályhoz tartozóként leszámítva.

Szádirányú méréseknél látható, hogy több a magas érték.

- Tölgy objektumai bizonyos mértékben átfednek a kőris- és bükk osztállyal, a tölgy osztály foglalja magába a másik kettő bizonyos részét
- Cseresznye objektumai bizonyos mértékben átfednek az erdei fenyő osztállyal, a cseresznye osztály foglalja magába a másik bizonyos részét

Az előző két megállapítás nem köszön vissza szignifikánsan a súlyértékek elemzésénél.

- Bükk és kőris osztályok is átfednek egymással. Mivel kölcsönösen magas a két érték, feltételezhető, hogy van közös része a két osztálynak. Ez egybevág azzal, hogy a súlyértékek alapján egy bükk objektum átsorolódott a kőris osztályba.

Összefoglalás

A totál reflexiós kiegészítő egységgel (ATR) fafurnér mintákról felvett FT-IR spektrumok jel/zaj viszonyát a minta ZnSe egykristályhoz való illeszkedése, az érintkezés „felfekvésének” jósága, valamint a felületi érdessége egyértelműen befolyásolja. Minél nagyobb mértékű a furnér felfekvés és minél finomabb csiszolópapírral előkészített a felület a spektrum jel/zaj viszonya szinte arányosan nagyobb értékűvé válik. A csiszolás utáni portalanítás elengedhetetlen része a mintafelület mérésre való előkészítésének. Tökéletlen portalanítás, részlegesen poros felület az egykristályhoz való illeszkedés jelentősen csökkenti, ami a jel/zaj viszony jelentős értékcsökkenésében jelentkezik.

A faanyag összetételének száliránnyal párhuzamos, illetve arra merőleges eltérő inhomogenitásai az ATR spektrumok szórásértékeit szignifikánsan nem befolyásolják. Mind a szálirányú, illetve szálirányra merőleges érintkezésnél, a ZnSe kristályban az IR sugárzás a faanyag kémiai összetétel eltéréseiből (korai és késői pászták) fakadó lokális IR fényelnyelés eltéréseket jelentősen integrálja, kompenzálja.

A vizsgált faanyagtípusok mintáinak az FT-IR spektrumok PCA elemzése alapján megállapítható, hogy négy-öt főkomponensének terében egymástól megkülönböztethetően csoportosulnak.

Köszönetnyilvánítás

A dolgozatom kivitelezésével kapcsolatban szeretném köszönetemet kifejezni az Erdőmérnöki Kar Kémiai Intézetének, hogy az FT-IR spektrometriai infrastruktúrát méréseim kivitelezéséhez rendelkezésemre bocsátotta.

Külön köszönöm témavezetőimnek, Németh Zsolt István egyetemi docensnek és Rákosa Rita egyetemi adjunktusnak a témám kidolgozásának irányítását, illetve a tőlük kapott szakmai támogatást.

Szükséges megemlíteni, hogy a vizsgálatok furnérmintáit Németh Róbert egyetemi tanár, a Faanyagtudományi Intézet igazgatója biztosította számunkra.

Sopron, 2014.11.03.

Kiss Péter Áron

Irodalomjegyzék

- Borosy, Csoportosítás (Alakfelismerés), in Sokváltozós adatelemzés (Kemometria), szerk.: Horvai György Nemzeti Tankönyvkiadó Budapest, 2001.
- H. H. Willard, L. L. Merritt, J. A. Dean, F.A. Settle: Instrumental Methods of Analysis, Wadsworth Publishing Company Belmont, California, 1988.
- http://hu.wikipedia.org/wiki/Elektrom%C3%A1gneses_sug%C3%A1r%C3%A1s#mediaviewer/File:EM_Spectrum_Properties_edit_hu.svg
- Kristóf János: Kémiai analízis II (Nagyműszeres analízis), Veszprémi Egyetemi Kiadó, Veszprém, 2000.
- N. Bobby, W. Eg, Johnson M. (2012): FT-IR Studies on the leaves of Albizia Lebbeck Benth, Int J Pharm Pharm Sci, Vol 4, Suppl 3, 293-296.
- Németh Károly: Faanyagkémia: Kémiai szerkezet, reakciók, Mezőgazdasági Szaktudás Kiadó, Budapest, 1997.
- Molnár Sándor: Faanyagismeret, Mezőgazdasági Szaktudás Kiadó, Budapest, 2001.
- Preklet Edina: A faanyag fotodegradációjának vizsgálata különböző hullámhosszúságú ultraibolya és látható lézerfényvel történő besugárzása esetén – Doktori (Ph.D.) értekezés, Nyugat-magyarországi Egyetem, Cziráki József Faanyagtudomány és Technológiák Doktori Iskola, Sopron, 2006.
- PerkinElmer Life and Analytical Sciences: FT-IR Spectroscopy, Attenuated Total Reflectance (ATR), 2005.
http://www.utsc.utoronto.ca/~traceslab/ATR_FTIR.pdf
- Rezgési spektroszkópia alkalmazása egyensúlyi állandó meghatározására, 2012.
http://foundation01.chem.elte.hu/Vegyesz_MSC/Rezgesi%20spektroszkopia%20alkalmazasa.pdf
- R. C. Wu, J. Shou, P. Yu, C. Cheng (2012): Application of FT-IR Spectroscopy Coupled with Chemometrics for Authentication of Taxus chinensis (Pilger), Journal of Chinese Medicine Research and Development (JCMRD), Vol 1, Iss 3, 61-69.
- Szepesvári, Adatok értelmezése, in Sokváltozós adatelemzés (Kemometria), szerk.: Horvai György Nemzeti Tankönyvkiadó Budapest, 2001.