



# Faktorová analýza v Mössbauerově spektroskopii a RTG difrakční fázové analýze

# Factor analysis in Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction analysis

*Camara A. H.* ČVUT Praha E-mail: aly.hawa.camara@fjfi.cvut.cz

Ze souboru vzorků obsahujících železo byly metodami Mössbauerovy spektroskopie a rtg difrakční analýzy získána data, na která byla aplikována faktorová analýza, díky níž bylo zjištěno, kolika faktory lze vysvětlit celkový rozptyl dat. Došlo tedy k vyčíslením faktorového skóre, k redukci počtu proměnných a vzniku faktorů, kterými byly nahrazeny původní proměnné. U Mössbauerovy spektroskopie se jedná o šest faktorů, kterým bylo přiřazeno šest původních proměnných a u rtg difrakční analýzy byly zjištěny tři faktory, kterým byly přiřazeny tři původní proměnné.

# ÚVOD

Faktorová analýza je vícerozměrná technika k vyšetření vnitřních vztahu (korelace) a souvislostí a odhalení základní struktury zdrojové matice dat. Jedná se o analýzu struktury vnitřních vztahů mezi velkým počtem původních znaků využitím souboru menšího počtu latentních proměnných, tzv. faktorů. Jinými slovy lze faktorovou analýzu popsat jako metodu používanou pro nalezení lineárních závislostí mezi parametry a výpočty nových proměnných faktorů, které vysvětlují rozptyl parametrů původních [1, 2]. Faktorová analýza je v podstatě lineární transformace, ortogonální rotace, kterou následuje změna měřítka, jejímž výsledkem jsou nové hypotetické proměnné a faktorové schéma, které nesou regresní koeficienty faktorů na původně proměnné. Cíl všech rotačních strategií je dosažení srozumitelného profilu faktorových zátěží (jednoduché struktury). Na začátku jsou identifikovány faktory, a posléze je každému faktoru přidělený obsahový (nejčastěji fyzikální) význam, pomocí kterého je každý původní znak vysvětlen vybraným faktorem. Nejdůležitější jsou dva primární

A set of samples containing iron was measured by Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction analysis and the obtained data were then analyzed by factor analysis. The factor analysis revealed several factors that can explain the total variance of the data. Factor scores were quantified, number of variables was reduced and new factors were found, which replaced the original variables. In the Mössbauer spectroscopy data, six factors were found and correlated to six of the original variables, whereas the diffraction data were explained by three factors, which were assigned to three of the original variables.

cíle faktorové analýzy, a to sumarizace a redukce dat. Sumarizace dat využívá faktorová analýza faktorů tak, aby data vysvětlila a usnadnila jejich pochopení daleko menších počtem latetních proměnných, než je počet původních znaků. U redukce dat se dosahuje vyčíslení skóre pro každý faktor a následnou náhradu původních znaků novými latentními proměnnými – faktory. Metoda patří mezi metody snížení dimenze neboli redukce počtu původních znaků. U této analýzy se předpokládá, že každý vstupující znak můžeme vyjádřit jako lineární kombinaci nevelkého počtu společných skrytých faktorů a jediného specifického faktoru. U metody faktorové analýzy je snaha vysvětlit závislost znaků. Mezi nevýhody metody patří nutnost zvolit počet společných faktorů před prováděním samotné vlastní analýzy.

Faktorová analýza poskytuje nejjednodušší lineární hypotézu struktury, která stojí za navzájem korelujícími veličinami. Odpovídá na otázku, kolik a které faktory nebo hypotetické veličiny jsou nutné pro co nejpřesnější reprodukci a formálně matematicky vysvětlit pozorované korelace mezi proměnnými. Toto je záležitostí vhodně zvolené parametrizace pozorování. Výběr proměnných z jedné strany musí nevyhnutelně poskytnout nebo postavit do popředí jiné faktory než širší výzkum. Před každou analýzou je nutné z důvodu sjednocení měřítek provést standardizaci neboli transformaci, která zajistí nulový průměr a jednotkovou směrodatnou odchylku dat.

Faktorový problém spočívá v určení druhu a počtu souřadnicových os potřebných ke znázornění korelací mezi proměnnými. Vyřešit tento problém lze tím, že hledáme jednoznačnost řešení systému rovnic. Dalším problémem je počet faktorů, na který lze pohlížet z různých stran. Lze například argumentovat všeobecnými vědeckými hledisky nebo můžeme požadovat vysvětlení určitého procenta celkového rozptylu nebo extrahovat faktory objasňující dostatečně významný podíl rozptylu proměnných a podobně. Extrakce pak dává schéma ortogonálních faktorů neboli faktorový prostor. Souřadnicové osy jsou dány faktory a každou proměnnou je možné vyjádřit vektorem, jehož souřadnice jsou příslušné faktorové zátěže. Zmíněné schéma není jednoznačně dané, z důvodu existence nekonečně mnoha poloh souřadnicových os ve faktorovém prostoru, reprodukujícího korelační matici stejnou měrou. Faktorová analýza má za cíl odvodit hypotetické veličiny z množství pozorovaných proměnných. Hypotetické veličiny mají opodstatnění a dostatečně přesně objasňují pozorování. Faktorový problém tedy spočívá v nalezení nejmenšího počtu hypotetických veličin pro vysvětlení lineárních závislostí mezi původními proměnnými. Rotační problém popisuje nalezení nejjednodušších možných vztahů proměnných a faktorů v již určeném společném faktorovém prostoru. Z geometrického hlediska se souřadnicová soustava lokalizuje tak, aby maximální počet proměnných ležel v co možná nejužší oblasti okolo souřadnicových os, tzn. saturace a(i,j) byly blízké ±1 nebo 0. Z algebraického hlediska jde o minimalizaci kritéria jednoduchosti struktury faktorové matice.

Pokud fázová analýza vykáže smysluplné výsledky, má význam počítat také hodnoty nových veličin, tzv. faktorové skóre. Faktory jsou nepozorovatelné, a proto se jakákoliv empirická faktorová skóre pouze odhadují společnými faktory nikoliv faktory skutečnými. Pro výpočet odhadů se využívá mnoho postupů, např. metoda odhadu faktorových skóre vícenásobným regresním počtem, jejíž výsledky zaručují velmi blízké případy extrakce plného počtu faktoru, kdy je možný přímý výpočet ze základního modelu faktorové analýzy. Ve většině případů faktorová analýza vychází z matice naměřených dat, kterou lze uvažovat ve dvou směrech. Počítají se korelace mezi sloupci, které jsou proměnnými, a označuje se jako tzv. R-technika, která se používá pro izolaci skupin proměnných, které navzájem souvisí a určují jeden faktor. Na druhou stranu je možné vysvětlovat korelace mezi řádky, tzn. zjišťovat vztahy mezi jednotlivými měřeními. Pak se jedná o tzv. Q-techniku, kde se postup užívaný v P-technice přenáší na vztahy mezi měřenými objekty. Výsledkem jsou informace o počtu faktorů neboli o počtu význačných skupin objektů, které mají podobné naměřené vlastnosti **[3]**. Daleko názornější než numerické hodnoty je grafické znázornění faktorové analýzy. Cílem analýzy je nalezení způsobu zestručnění informace obsažené ve značném počtu původních znaků zdrojové matice dat do menších souborů nových, složených neboli latentních dat, a to s minimálními datovými ztrátami. Jedná se o vyhledávání základních konstrukcí nebo rozměrů, které budou obsahovat informaci obsaženou ve všech původních znacích.

Mössbauerova spektroskopie je nedestruktivní metoda založená na jevu bezodrazové rezonanční fluorescence fotonu záření v atomovým jádrem. Základem metody je tzv. Mössbauerův jev. Při přechodu volného jádra, které se nachází v klidu v excitovaném stavu, do stavu základního, dochází k vyzáření energie ve formě fotonu  $\gamma$  - záření. Tato energie by měla být rovna rozdílu energetických hladin vzbuzeného a základního stavu jádra, ale v důsledku zpětného rázu je menší. Protože foton s sebou odnáší hybnost  $p_{\nu} = E_{\nu}/c$ , pak ze zákona zachování hybnosti plyne, že jádro získá stejně velkou hybnost, ale opačného směru, a tím získá i energii zpětného rázu o velikosti  $E_r = E_{\gamma}^2/2\text{mc}^2$ , kde  $E_{\gamma}$  je energie jaderného přechodu, *m* je hmotnost jádra a *c* je rychlost světla. Energie fotonu vyzářeného volným jádrem je tedy rovna  $E_{\gamma}^{6} = E_{\gamma} - E_{r}$ . Poté, co je foton emitován z jednoho jádra, je absorbován jiným jádrem stejného druhu, tj. jádrem se stejným počtem protonů a neutronů, jako má první jádro, nacházejícím se v základním stavu. To má za následek excitaci jádra, tzn. dojde k rezonanční absorpci. Energie absorbovaného fotonu je rovna  $E_{\gamma}^{\alpha} = E_{\gamma} + E_r$ . Mössbauerův jev je pozorovatelný pouze na určitých izotopech, kterými jsou například 57Fe, 57Co,  $^{129}$ In.

Zářič je tvořen radioaktivním zdrojem, který obsahuje mössbauerovsky aktivní izotop ve vzbuzeném stavu. Absorbérem (vzorkem) je pak zkoumaný materiál, v němž je přítomen stejný izotop, ale v základním stavu. Základní vlastnosti Mössbauerovy spektroskopie je jeho prvková a izotopická selektivnost. Pohyb zářiče se obvykle realizuje pomocí elektromechanického měniče.

Metoda umožňuje s velmi vysokou přesností sledovat změny hladin energie v atomových jádrech určitých prvků. Uvedené změny jsou důsledkem tzv. hyperjemných interakcí, kterými jsou elektromagnetické interakce mezi jádrem a elektrony z jeho bezprostředního okolí. Hyperjemnými interakcemi lze například sledovat změny v magnetické a elektronové struktuře, strukturní defekty nebo vibrace krystalové mřížky.

Detektorem je potom měřena intenzita  $\gamma$  záření prošlého vzorkem, která je závislá na relativní rychlosti pohybu zářiče a vzorku. Nejběžnější metoda měření spočívá v tom, že měřený vzorek je v klidu a zářič se pohybuje konstantní nebo proměnnou rychlosti. Kvanta  $\gamma$  emitované energie zářičem se mění v důsledku Dopple-

Koroze a ochrana materiálu 58(3) 88-94 (2014)

DOI: 10.2478/kom-2014-0010

rova jevu v závislosti na okamžité rychlosti zářiče. Závislost registrované intenzity prošlého záření se nazývá Mössbauerovým spektrem, jehož základními parametry jsou tzv. hyperjemné parametry, s hodnotami přímo souvisejícími s hyperjemnými interakcemi. Izomerní posun je vyvolán posunem hladin energie jádra, způsobených monopolní interakcí mezi jádry a s-elektrony, jejichž hustota je nenulová i v oblasti jádra. Zároveň zvýšením elektronové hustoty v jádře dochází ke zmenšení izomerního posunu a naopak. Izomerní posun je uváděn v jednotkách (mm s<sup>-1</sup>), a to z důvodu, že rezonanční absorpce fotonu je dosažena dopplerovskou modulací jeho energie, kdy se zdroj záření gama a vzorek vzájemně pohybují tzv. rezonanční rychlostí. Hodnotu izomerního posunu ovlivňuje zejména valence, koordinace a spinový stav atomu, tedy charakter chemické vazby. K detekci prošlých fotonů γ-záření se používají proporcionální, scintilační nebo polovodičové detektory.

Mössbauerova spektroskopie se nejčastěji používá jako prostředek fázové analýzy. Na základě mössbauerovského spektra je možné získat informaci jak o kvantitě, tak i kvalitě studované fáze ve vyšetřovaném vzorku. Využívá se zejména pro kvantitativní fázovou analýzu vzorků obsahujících železo s citlivostí od 0,5 %. Do oblasti využití lze uvést identifikaci minerálů a určování fázového složení vzorků v geologii, fázovou analýzu vzorků v metalurgii, identifikaci produktů koroze atd. Vzhledem k velké rozlišovací schopnosti metody je možno ji využit, kromě jiného, k posouzení strukturních defektů. U magnetických vzorků je možné sledovat texturu, což se týká válcovaných materiálů.

RTG difrakční analýza stanovuje přímo jednotlivé krystalické fáze, rozlišuje tedy také jednotlivé polymorfní modifikace téže látky. Velkou předností metody je kromě nedestruktivnosti této analýzy i ta okolnost, že vyžaduje jen velmi malé množství látky, naopak nevýhodou je, že detekuje jen krystalické látky a dosažitelná přesnost i mez detekce jsou řádově horší než u prvkové analýzy [4]. Pro kvantitativní analýzu je nejvýhodnější použití metody RIR (reference intensity ratio), která pracuje s výpočtem založených na sumaci všech fází v celku a vyžaduje tedy znalost kvalitativního obsahu všech krystalických fází. Při obsahu amorfních fází jsou výsledky stanovení značně zkreslené. *RIR* (neboli korundové číslo  $I/I_c$ ) je číslo definované jako poměr intenzity nejsilnějšího píku zkoumané fáze ku nejsilnějšímu píku korundu (113) v jejich směsi s hmotnostním zlomkem korundu  $w_c$  i zkoumané fáze w<sub>i</sub> rovným 0,5 (tj. 50 %). Tento poměr je rovný poměru kalibračních konstant  $K_{si}$  a  $K_{hc}$  a je pro většinu látek tabelován:

$$\begin{array}{l} I_{\rm sj} = K_{\rm sj} \cdot w_{\rm j} \\ I_{\rm hc} = K_{\rm hc} \cdot w_{\rm c} \end{array} \implies \left( RIR \right)_{\rm j} = \left( \frac{I_{\rm sj}}{I_{\rm hc}} \right)_{w_{\rm j} = w_{\rm c}} = \frac{K_{\rm sj}}{K_{\rm hc}} \quad (1)$$

kde *I* značí intenzity naměřené za stejných podmínek měření, index *c* označuje korund a indexy *s* a *h* označují nejsilnější píky fáze *j* a korundu. Pokud se stanovovaný vzorek skládá ze dvou fází *j* a *k*, mohou být čísla  $(RIR)_j$  a  $(RIR)_k$  použita ke stanovení poměru jejich hmotnostních zlomků  $w_j$  a  $w_k$  i bez přídavku korundu, tzn. bezstandardovou metodou:

$$\begin{aligned}
& I_{sj} = K_{sj} \cdot w_{j} \\
& I_{tk} = K_{tk} \cdot w_{k}
\end{aligned} \Rightarrow \frac{w_{j}}{w_{k}} = \frac{I_{sj} \cdot K_{tk}}{I_{tk} \cdot K_{sj}} = \\
& = \frac{I_{sj} \cdot K_{tk} \cdot K_{hc}}{I_{tk} \cdot K_{sj} \cdot K_{hc}} = \frac{I_{sj} \cdot (RIR)_{tk}}{I_{tk} \cdot (RIR)_{sj}}
\end{aligned}$$
(2)

kde *t* označuje nejsilnější pík fáze *k*. Absolutní hmotnostní zlomek obou fází se pak získá z předpokladu, že obě fáze tvoří celý vzorek ( $w_j + w_k = 1$ ). Pro aplikaci v průmyslové analýze metalurgických materiálů z různých zdrojů, často neznámého složení a s možným výskytem amorfních fází, je daná metoda zatížená vysokou chybou stanovení. Velkým problémem intenzit difrakčních linií je to, že tyto hodnoty nejsou obecně vzato správné, jsou totiž uváděny jako relativní čísla a vyjadřují poměr intenzity dané difrakční linie příslušné látky k intenzitě její nejsilnější difrakční linie, čímž mohou vznikat při identifikaci směsi systematické chyby [**5**].

#### EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

K Mössbauerově metodě bylo použito 15 vzorků tloušťky 0,1 mm a průměru 15 mm, které byly poskytnuty firmami ATG s.r.o. a z dílny leteckého nástrojařství Výzkumného a zkušebního leteckého ústavu, a.s. a vzorky byly měřeny na Katedře anorganické chemie, Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy v Praze.

Jako zdroj y záření v našem měření využíváme metastabilní 57mFe, které emituje γ záření o energii 14,4 keV, ale má velmi krátkou dobu života (t =  $10^{-7}$  s). Proto se generuje během měření z prekurzoru, jímž je izotop 57Co  $(T_{1/2} = 270 \text{ dn}\text{u})$ , který přechází pomocí elektronového záchytu na 57mFe. Prekurzor 57Co je umístěn ve vhodné matrici - Cr či Rh. Tímto způsobem se studují pouze atomy izotopu 57Fe, jejichž přírodní zastoupení je 2,14%. Jelikož všechny izotopy železa mají stejné chemické a strukturní vlastnosti, jsou tedy v krystalech dané látky rozmístěny statisticky rovnoměrně a lze tedy vlastnosti interpretované z Mössbauerovských spekter aproximovat na veškeré železo. Přístroj bylo nutno nakalibrovat, pomocí fólie  $\alpha$ -Fe, jehož parametry jsou d = 0,0 mm s<sup>-1</sup>,  $s = 0,0 \text{ mm s}^{-1}$ , H = 33,0 T, a bylo využito transmisního uspořádání s proporcionálním detektorem.

Pro RTG difrakční analýzu byly použity vzorky z různých lokalit v ČR a všechny měly stejné rozměry: 20 mm × 20 mm (± 2 mm), tloušťka 4 mm (± 1 mm). K analýze vzorků byl použit difraktometr Bruker D8 s kobaltovou rentgenkou (Co-K<sub>a</sub>,  $\lambda = 1,78897$  Å), nacházející se ve Výzkumném centru Nové technologie na Západočeské universitě v Plzni, s velkoplošným proporcionálním detektorem, který je základem GADDS

systému. Uvedený detektor má 8192 obrazových elementů (pixelů) na ploše 314 cm<sup>2</sup>. U připravených vzorků byla určovaná integrální intenzita reflexí feritu. Veškerá měření byla provedena na jediném přístroji při konstantním nastavení v průběhu co možná nejkratší doby, aby byla maximálně omezena nežádoucí možnost proměnlivosti parametrů, za kterých se měření prováděla [6].

## VÝSLEDKY A DISKUZE

#### Mössbauerova spektroskopie

Obě spektra se dají nafitovat dvěma sextety. Izomerní posuny se pohybují okolo 0,00 mm s-1, z čehož se dá usoudit, že je přítomné pouze metalické železo. Kvadrupólové štěpení má hodnotu kolem 0,00 mm s<sup>-1</sup>, což rovněž odpovídá metalickému železu.

Hodnoty hyperjemného pole jsou v blízkosti hodnoty 33 T, což je hodnota charakteristická pro α-Fe. Vlivem legovacích přísad (zřejmě Cr) jsou hodnoty druhých sextetů posunuty k nižším hodnotám. U druhého vzorku dosahují průměrné hodnoty hyperjemného pole nižších hodnot, z toho by se dalo usuzovat, že ve vzorku 2 je vyšší podíl legovacích přísad.

#### Problém faktorové analýzy: Analýza hlavních komponent (dále jen PCA) v R-programu

Do tohoto programu byla vložena vstupní data (511 hodnot), která byla získána Mössbauerovou spektroskopií a pomocí PCA analýzy redukována. Pro Spektrum 1 stejně jako pro Spektrum 2 bylo nalezeno 6 komponent, jejichž grafické znázornění je uvedeno na Obr. 3 a 5.

Z Obr. 3 plyne, že první vlastní hodnota je největší, z čehož vyplývá, že tato první komponenta definuje dimenzi s největším rozptylem. Míru rozptylu podél druhé hlavní komponenty představuje druhá vlastní hodnota a dále udává největší rozptyl kolmý (nezávislý) k první komponentě. Tento rozptyl je znázorněn na Obr. 4.



Fig. 1. Mössbauer spectrum 1

Fig. 2. Mössbauer spectrum 2

Tab. 1. Výsledné hodnoty pro Mössbauerovo spektrum 1 / Interpretation of the Mossbauer spectra 1

	Izomerní posun δ	Kvadrupólové štěpení ΔE <sub>Q</sub>	Hyperjemné pole B <sub>Hf</sub> (T)	Pološířka píku (FWHM) (mm s <sup>-1</sup> )	Relativní plocha (%)	Interpretace	
Subsp. 1	0,00	0,01	33,3	0,34	58	kovové železo ve slitině (poloha 1)	
Subsp. 2	0,04	-0,02	31,6	0,67	42	kovové železo ve slitině (poloha 2)	

Tab. 2. Výsledné hodnoty pro Mössbauerovo spektrum 2 / Interpretation of the Mossbauer spectra 2

	Izomerní posun δ	Kvadrupólové štěpení ΔE <sub>Q</sub>	Hyperjemné pole B <sub>Hf</sub> (T)	Pološířka píku (FWHM) (mm s <sup>-1</sup> )	Relativní plocha (%)	Interpretace
Subsp. 1	0,02	-0,01	33,4	0,40	40	kovové železo ve slitině (poloha 1)
Subsp. 2	0,05	0,02	30,2	0,58	60	kovové železo ve slitině (poloha 2)



Obr. 3. Závislost výsledných komponent na odchylce měření (Spektrum 1)

Fig. 3. The dependence of the resulting components of the deviation measurement



Obr. 4. Rozptyl nalezených komponent (Spektrum 1) Fig. 4. Variance components found (Spectrum 1)

Z Obr. 5, stejně jako tomu bylo u Obr. 3, plyne, že první vlastní hodnota je největší, z čehož vyplývá, že tato první komponenta definuje dimenzi s největším rozptylem. Míru rozptylu podél druhé hlavní komponenty představuje druhá vlastní hodnota a dále udává největší rozptyl kolmý (nezávislý) k první komponentě. Tento rozptyl je znázorněn na Obr. 6.

## RTG difrakční fázová analýza

#### Problém faktorové analýzy: PCA v R-programu

Do tohoto programu byly jako vstupní data vloženy poměry intenzit difrakčních linií a byla provedena PCA analýza, kterou byly jako výsledek nalezeny 3 komponenty, jejíž grafické znázornění je uvedeno na Obr. 7.



Obr. 5. Závislost výsledných komponent na odchylce měření (Spektrum 2)

Fig. 5. The dependence of the resulting components of the deviation measurement



Obr. 6. Rozptyl nalezených komponent (Spektrum 2) Fig. 6. Variance components found (Spectrum 2)

Z Obr. 7 plyne, že první vlastní hodnota je největší, což odpovídá již dříve získaným poznatkům, a tato první komponenta definuje dimenzi s největším rozptylem. Míru rozptylu podél druhé hlavní komponenty představuje druhá vlastní hodnota a dále udává největší rozptyl kolmý (nezávislý) k první komponentě. Tento rozptyl je znázorněn na Obr. 8.

# ZÁVĚR

Uvedeným způsobem faktorové analýzy se převádí obecně obtížný problém určení fázového složení směsi na podstatně jednodušší úlohu identifikace difraktogramů jednoduchých látek (jednotlivých komponent). PCA technika se také dobře uplatňuje jako univerzální metoda



Obr. 7. Závislost výsledných komponent na odchylce měření Fig. 7. The dependence of the resulting components of the deviation measurement



Obr. 8. Rozptyl nalezených komponent Fig. 8. Variance components found

Tab. 3.	Hodnoty intenzit	difrakčních	linií a jejich	poměrů pro	měřené v	vzorky / 7	The values	of the int	ensities of	diffraction l	lines and
their ra	tios measured for	r samples									

		Intenzity dif	rakčních linií					
Číslo	I <sub>110</sub>	I <sub>200</sub>	I <sub>211</sub>	I <sub>220</sub>		I /I	I /I	
vzorku		Mezirovinná v	zdálenost [pm]	1 <sub>200</sub> /1 <sub>110</sub>	<b>I</b> <sub>211</sub> / <b>I</b> <sub>110</sub>	1 <sub>220</sub> /1 <sub>110</sub>		
	203	143	117	101				
1	120	8	14	3	0,067	0,117	0,025	
2	124	10	23	9	0,081	0,185	0,073	
3	50	4	4	3	0,080	0,080	0,060	
4	77	5	14	4	0,065	0,182	0,052	
5	190	15	28	9	0,079	0,147	0,047	
6	70	16	10	8	0,229	0,143	0,114	
7	142	16	33	13	0,113	0,232	0,092	
8	101	9	27	8	0,089	0,267	0,079	
9	76	6	13	6	0,079	0,171	0,079	
10	51	3	10	4	0,059	0,196	0,078	
11	60	4	13	3	0,067	0,217	0,050	
12	70	5	20	7	0,071	0,286	0,100	
13	44	4	12	3	0,091	0,273	0,068	
14	103	7	13	2	0,068	0,126	0,019	
15	147	9	24	10	0,061	0,163	0,068	
16	98	9	23	8	0,092	0,235	0,082	
17	63	6	12	7	0,095	0,190	0,111	
18	79	7	18	8	0,089	0,228	0,101	
19	183	23	46	16	0,126	0,251	0,087	
20	175	17	45	15	0,097	0,257	0,086	
21	114	12	26	11	0,105	0,228	0,096	
22	140	18	39	13	0,129	0,279	0,093	
23	98	5	12	4	0,051	0,122	0,041	

Koroze a ochrana materiálu 58(3) 88-94 (2014)

DOI: 10.2478/kom-2014-0010

korekce vlivů reálné struktury. Výsledek jako separace má i užití při různých vlnových délkách. Vlastní hodnoty asociační matice jsou získány pomocí determinantů z charakteristické rovnice a představují rozptyl odpovídající hlavním komponentám. To tedy znamená, že každá vlastní hodnota odpovídá jedné komponentě, a tudíž máme tolik vlastních čísel, kolik máme objektů.

#### LITERATURA

- [1] Überla K. Faktorová analýza, ALFA: Bratislava, 1976.
- [2] Říčan P., Hampejsová O. Prolegomena k faktorové analýze, Státní pedagogické nakladatelství:Praha, 1972.
- [3] Chlada M. Zpracování signálů akustické emise pomocí umělých neuronových sítí, ČVUT:Praha, 2008.
- [4] Kochanovská A. Principy fázové kvantitativní analýzy. Materiálový sborník SVÚMT, Praha 1965.
- [5] L. S. Zevin, G. Kimmel *Quantitative X-ray Diffractometry*. Springer-Verlag:New York, 1955.
- [6] Camara, A. H. Aplikace faktorové analýzy na reálnou strukturu kovových materiálů, *Hutnické listy* 2013, 66 (3).