

HONKAJOKI OY
Energiaselaskenta
Hyperspektrikuvaus

Jari Pohjola
Jari Turunen
Tampereen yliopisto, Porin yksikkö
31.1.2020



SATAKUNTALIITTO

Vipuvoimaa
EU:lta
2014–2020



TIIVISTELMÄ

Tässä raportissa käsitellään ROBOCOAST R&D Center -hankkeessa Tampereen yliopiston Porin yksikössä Honkajoki Oy:lle tehtyä työtä. Työ on jakautunut kahteen osa-alueeseen: energiataselaskentaan sekä hyperspektrikuvauksen tulosten tarkasteluun.

SISÄLLYSLUETTELO

1.ENERGIAN KULUTUKSEN SEURANTA HONKAJOKI OY:N	
PROSESSILAITTEISSA	1
1.1 Koodi	2
1.2 Simulaatiotulokset.....	3
1.3 Johtopäätökset.....	6
2.HYPERSPEKTRIKAMERAN TESTAUS HONKAJOKI OY:N RAAKA-AINEILLA ...	7
2.1 Neuroverkkojen käyttö	8
2.2 Lineaarinen monimuuttujaregressio	12
3.YHTEENVETO.....	ERROR! BOOKMARK NOT DEFINED.
LÄHTEET	ERROR! BOOKMARK NOT DEFINED.
LIITE 1: ENERGIATASE	14
LIITE 2: HYPERSPEKTRI	22

1. ENERGIAN KULUTUKSEN SEURANTA HONKAKAJOKI OY:N PROSESSILAITTEISSA

Tampereen yliopiston tehtäväksi Robocoast-projektin puitteissa tuli energian kulutuksen seuranta ja mahdollisten lämpöhäviöiden estimoiminen toimilaitteisiin asennettujen sensoreiden ja niistä saatavan datan avulla. Toimilaitteisiin syötetään energiaa höyryn muodossa 3.6 MW höyryvoimalaitokselta, ja jalostettavaan raaka-aineeseen höyryn energiasta jää suurin osa. Loput höyryn energiasta poistuu lämpöhäviöinä sekä hönkähöyryn mukana:

$$E_{\text{höyry}} = E_{\text{tuote}} + E_{\text{lämpöhäviö}} + E_{\text{hönkähöyry}} \quad (1.1)$$

Laitteeseen tulevan höyryn energiaa voidaan arvioida tulevan höyryn lämpötilan ja paineen välisen relaation avulla. Honkajoki Oy:n toimitusjohtaja Matti Lehtinen toimitti taulukot, millä höyryn massavirtaa voidaan arvioida laitetoimittajan antamien kaavojen avulla toimilaitteen höyryventtiilin asennosta. Massavirta muunnetaan paineen ja entalpian (Matti Lehtisen toimittama taulukko) avulla tehoksi ja siitä energiaksi aikayksikköön sidottuna.

Raaka-aineeseen sitoutunutta energiaa voidaan arvioida tuotteen lämpötilan muutoksella ennen ja jälkeen kuumennusprosessin, kunhan tiedetään raaka-aineen ominaislämpökapasiteetti C_{pm} sekä prosessiteollisuudessa tarvittava massavirta mmv . Aikayksikkö on laskennoissa tunti, joten ajasta riippuvat suureet on skaalattava tunnin mukaan.

$$E_{\text{tuote}} = Q * t = mmv * C_{pm} * (T_2 - T_1) * (1 h) \quad (1.2)$$

Tuotteen ominaislämpökapasiteetiksi C_{pm} valittiin esiselvitysvaiheessa 3.22 kJ/Kg*K (K= Kelvin), mutta todellinen arvo on vielä selvityksen alla raportin kirjoitusvaiheessa. Massavirta mmv oletetaan aluksi 7500 kg/h, mikä on laitoksen massavirran keskiarvo. Keskiarvoa tarkennetaan syöttökairalta saatavan tonnitietolaskurin mukaan, jonka pulsseista saadaan aikaan suhteutettuna todellinen vaihtelu massavirralla. T_1 on tuotteen sisäänmenolämpötila ja vastaavasti T_2 on tuotteen ulostulolämpötila toimilaitteelta.

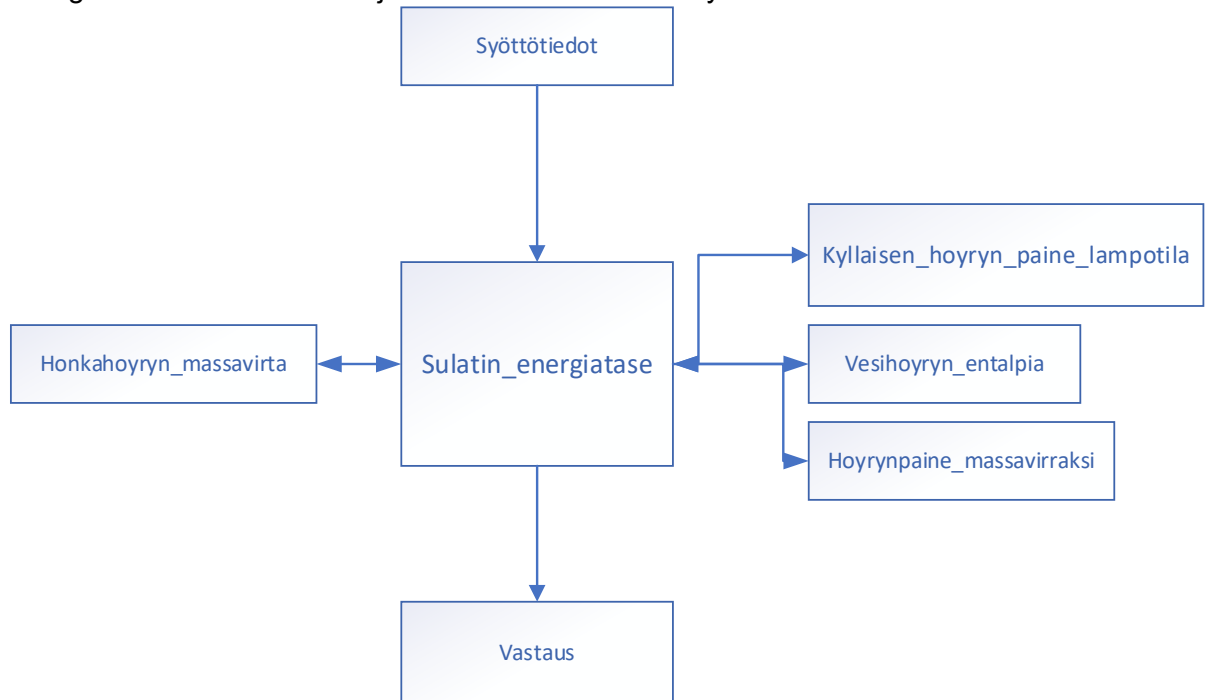
Hönkähöyryn osuutta voidaan arvioida massavirran ja entalpian avulla. Massavirta on haastava, sillä sen arviointiin voidaan käyttää useita eri menetelmiä. Työhön valittiin Bernoullin yhtälö massavirran estimaatiksi sen yksinkertaisuuden vuoksi.

$$Q_{ev} = \eta * \pi * r^2 * \sqrt{\frac{2 * \Delta P}{\rho}} \quad (1.3)$$

Missä r on putken säde, ΔP paine ja ρ tiheys. On huomattava, että kyseessä on tilavuusvirran teoreettinen maksimi, joka ei ota huomioon putken pituutta, eikä seinämien karheutta. Tarvittaessa tilavuusvirtaa voidaan pienentää η - kertoimella asettamalla se < 1 .

1.1 Koodi

Energiataseen laskennan ohjelman rakenne on esitetty kuvassa 1.1.



Kuva 1.1. Energiataseen laskentaohjelman kuvaus

Ohjelmisto, kuvassa 1.1, on koodattu Matlab simulaatioympäristöä ajatellen, mutta koodin yksinkertaisuuden vuoksi se on helposti koodattavissa muille ympäristöille. Ohjelman pääosa on Sulatin_energiatase, joka kutsuu tarvittaessa neljää aliohjelmaa (honkahöyryn_massavirta, kylläisen_höyryn_paine_lamptila, vesihöyryn_entalpia, höyrynpaine_massavirraksi) parametrien saamiseksi.

Syöttöarvoiksi tarvitaan muuttuvat arvot, jotka on esitetty taulukossa 1.1.

Taulukko 1.1. Prosessiin tarvittavat syöttötiedot.

Mitattava kohde	Muuttuja	Mittayksikkö	Oletusarvo /AWS kanava
Päähöyryn paine	P	Bar	2307_PT01
Hönlöhöyryn (ali)paine	P2	mBar	2307_PT02
raaka-aineen tulolämpötila	T1	°C/°K	20 Mahdollisesti (2307_TT01)
raaka-aineen lähtölämpötila	T2	°C/°K	2307_TT05
raaka-aineen määrä / h	mmv	Kg/h	2303_COUNTER
Höyryventtiilin asento	a	0...1	0.83

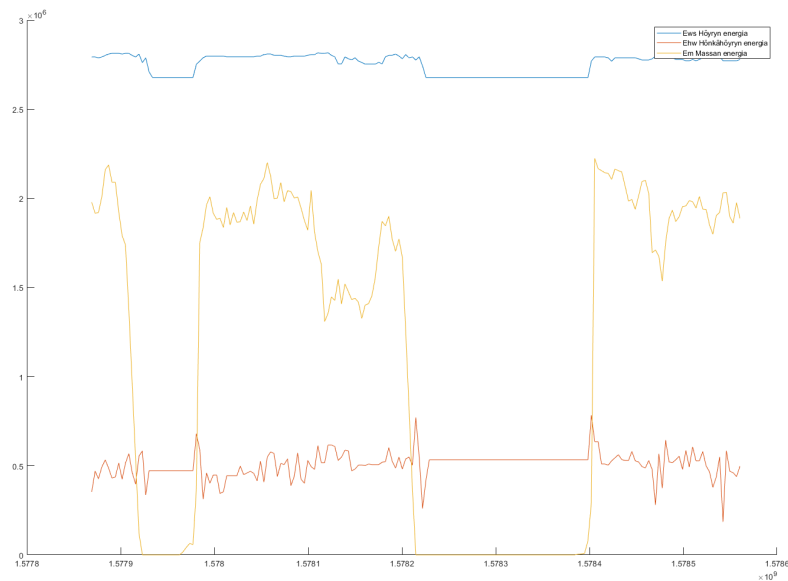
Tuotteen määrän kairatieto on lisätty mukaan, *mmv*-muuttujaan. Kairatieto on lisätty ohjelmaan, joka noutaa kaiken tarvittavan tiedon Mathworks mat tiedostoista ja ohjelma laskee hetkellisen massavirran estimaatin (kg/h). Tuotteen ominaislämpökapasiteetti olisi korjattava oikeaksi. Lisäksi höyryventtiilin asento *a* voidaan liittää mukaan, mikäli tieto on tulossa AWS pilveen, kirjoitushetkellä sitä ei ollut vielä saatavilla. Hönlöhöyrykanava 2307_PT02 on varmistettu oikeaksi viimeisessä kokouksessa.

Muuttujien yksiköt on valittu sen mukaan, millä tavalla ne olivat AWS pilvessä kirjoitushetkellä.

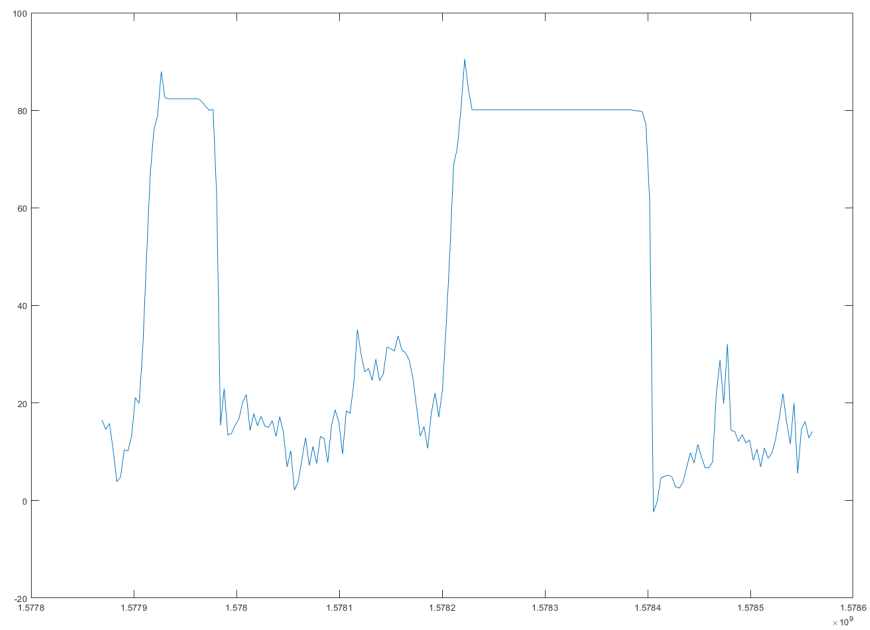
Erotusprosentti on se määrä, mikä puuttuu pähöyryn sekä tuotteeseen sitoutuneen että hönkähöyryn energioista. Erotusprosentti on se energiamäärä prosentteina mikä ”katoaa” johonkin, esimerkiksi hukkalämpönä.

1.2 Simulaatiotulokset

Kuvassa 1.2. nähdään simulaatiotulokset höyryventtiilin asennolla $\alpha=0.66$.

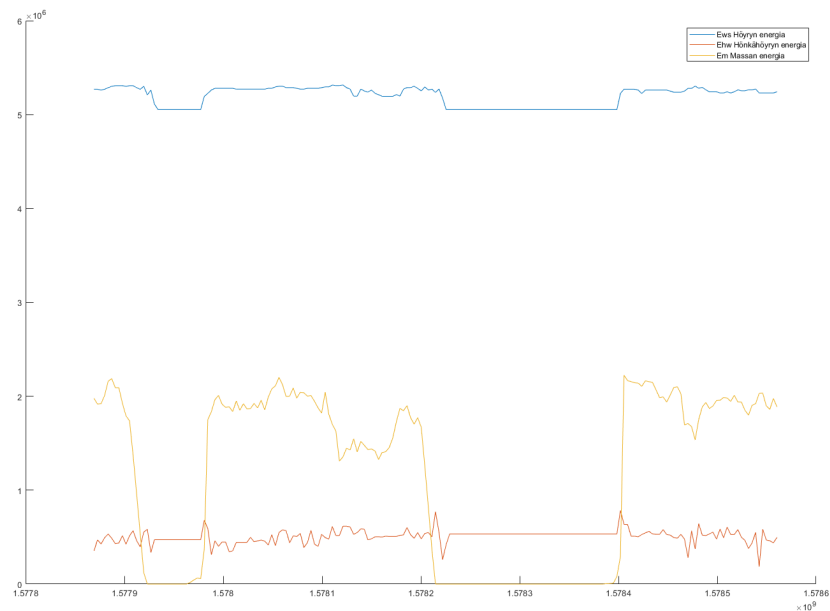


Kuva 1.2. Energiataseet ajan funktiona tulevassa höyryssä, tuotteeseen siirtyneenä sekä hönkähöyryssä, kun höyryventtiilin asento on $\alpha=0.66$.

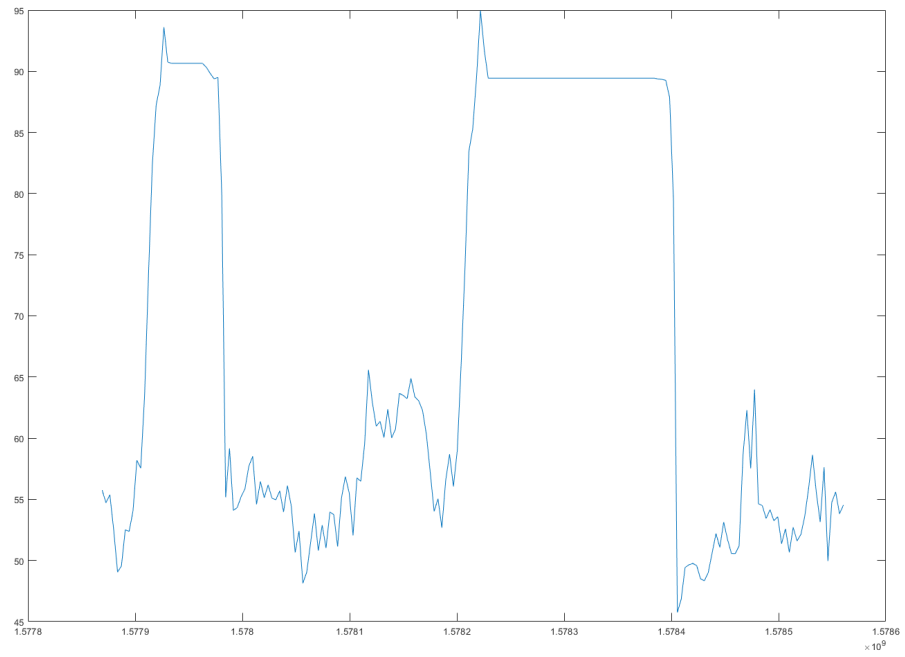


Kuva 1.3. Energian häviöprosentti, kun höyryventtiilin asento on $\alpha=0.66$.

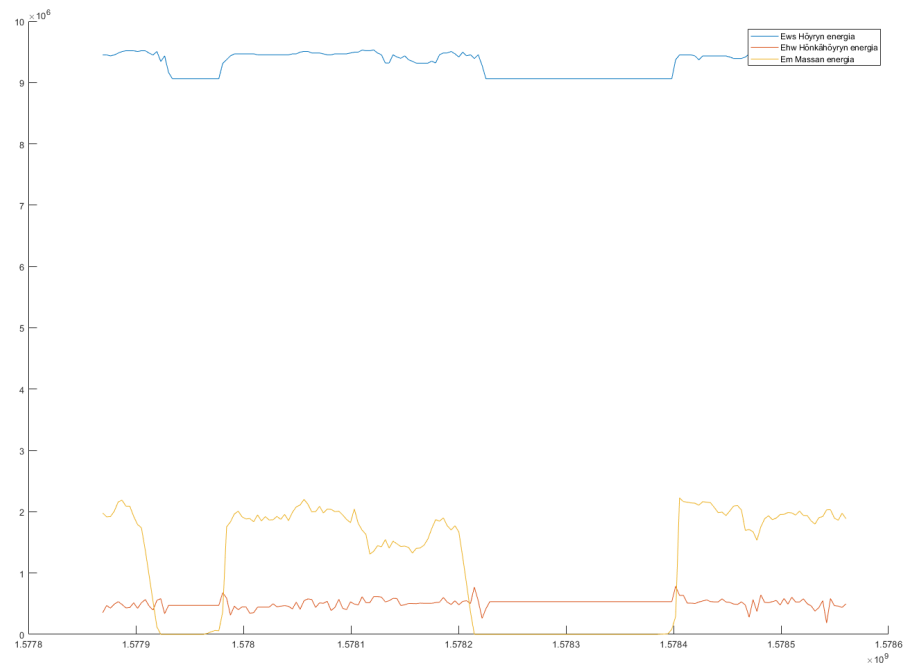
Kuvasta 1.3 nähdään, että häviöprosentti on noin 20 % luokkaa tehtaan käynnissä oloaikana ja kun höyryventtiilin asento on $\alpha=0.66$. Kaikissa kuvissa on kahdeksan päivän aikajakso, välillä 1.1.2020 klo 8:00 – 9.1.2020 klo 8:00.



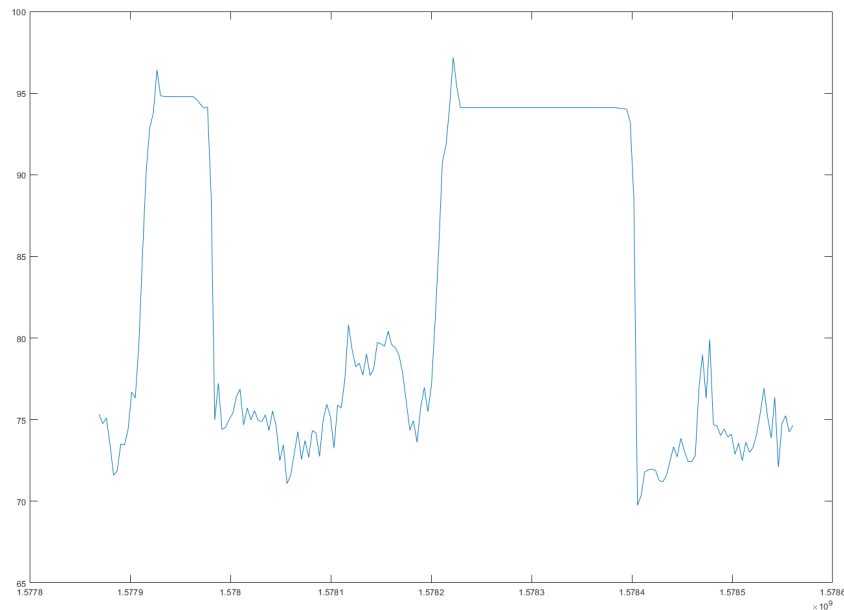
Kuva 1.4. Energiataseet ajan funktiona tulevassa höyryssä, tuotteeseen siirtyneenä sekä höikäilyssä, kun höyryventtiilin asento on $\alpha=0.83$.



Kuva 1.5. Energian häviöprosentti, kun höyryventtiilin asento on $\alpha=0.83$.



Kuva 1.6. Energiataseet ajan funktiona tulevassa höyryssä, tuotteeseen siirtyneenä sekä hönkähöyryssä, kun höyryventtiilin asento on $\alpha=0.99$.



Kuva 1.7. Energian häviöprosentti, kun höyryventtiilin asento on $\alpha=0.99$.

Kuvista 1.4-1.7 nähdään, että häviöprosentti luonnollisesti nousee, kun höyryn energia oletetaan tietyille venttiilin asetuksille, tässä tapauksessa $\alpha=0.83$ (häviö noin 55 %) ja $\alpha=0.99$ (häviö noin 75 %) tehtaan käynnissä oloaikana. Esimerkit kuvissa 4 – 7 ovatkin epärealistisia, sillä tuotteeseen sitoutunut energia ei vastaa höyryn antamaa energiaa, ja näin ollen häviöprosentti muodostuu suureksi. Onkin syytä olettaa, että höyryventtiilin asento seuraa adaptiivisesti logiikan mukaisesti höyryn tarvetta. Kaikissa kuvissa on kahdeksan päivän aikajakso, välillä 1.1.2020 klo 8:00 – 9.1.2020 klo 8:00.

1.3 Johtopäätökset

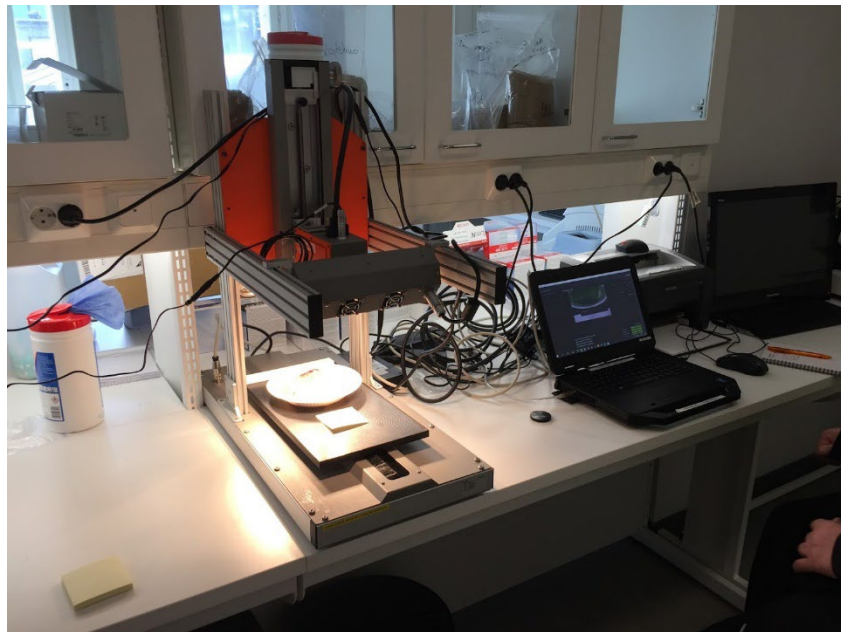
Edellä esitetty energianlaskentamekanismi on hyvin yksinkertainen, ja se on helposti monistettavissa muihinkin höyryä käyttäviin toimilaitteisiin, kunhan tarvittavat kanavat ovat tiedossa ja niiden sisältämä tieto on ajantasaista.

Johtopäätöksenä voidaan todeta, että höyrystä karkaava hukkaenergia on pieni, silloin kun höyryn energia on pieni. Kuten höyryventtiilin asennosta $\alpha=0.66$ (kuvat 2 ja 3) nähdään, häviö voi olla pienimmillään vain 20% luokkaa. 20% hukkaa voidaan tietysti vielä pienentää laitteen lisäeristyksen avulla.

Energialaskenta sulattimen_energiatase.m on monistettavissa muihinkin laitteisiin, kunhan laitteen höyryventtiilin asentotieto a välillä $0 \dots 1$, tulevan ja lähtevän massan lämpötilat, sekä höyrynpaineet (tuleva päänhöyry laitteelle (venttiilin asentotieto) sekä hönkähöyryn alipaine) ovat tiedossa. Lisäksi jos tuotteen ominaislämpökapasiteetti muuttuu prosessin aikana, sekin tulisi vaihtaa laitteiden välillä.

2. HYPERSEKTRIKAMERAN TESTAUS HONKAKAJOKI OY:N RAAKA-AINEILLA

Hyperspektriosuuden tavoitteena on ollut tehdä esiselvitys hyperspektrikameran soveltuvuudesta Honkajoki Oy:n käyttöön. Hyperspektrikamera on laite, jolla saadaan selville eri aallonpituusalueiden tarjoama informaatio kuvattavasta näytteestä. Honkajoki Oy:n tapauksessa laitteen käytön tavoitteena olisi tunnistaa tehtaan prosessissa olevasta massasta erilaisia parametreja, kuten esimerkiksi kuiva-ainepitoisuus, pilaantumisaste ja ravinnepitoisuudet. Hyperspektrikameroiden valmistajia kartoitettaessa Specim Oy:n tuotteet vaikuttivat sopivan käyttötarkoitukseen parhaiten. Specim Oy:n yhteyshenkilönä toimivan Esko Herralan kanssa sovittiin mahdollisuudesta lähettää näytteitä Specim Oy:n laboratorioon Ouluun tutkittaviksi. Mittaukset laboratoriossa osoittautuivat haasteellisiksi, joten mittaukset päätettiin suorittaa paikan päällä Honkajoella. Mittaukset suoritettiin 15.4. Honkajoella (paikalla Esko Herrala Specim Oy:stä sekä Jari Pohjola ja Jari Turunen Tampereen yliopistosta). Mittauksia tehtiin yhteensä 53 näytteelle (24 vanhennuskoenäytettä, 14 Nurmosta toimitetusta erästä otettua näytettä sekä 15 Raumalta toimitetusta erästä otettua näytettä). Mittaukset tehtiin käyttäen Specim Oy:n FX17-hyperspektrikameraa, jonka aallonpituusalue on 900-1700 nm, joka on jaettu 224 kanaavaan. Mitatut näytteet lähetettiin hyperspektrikuvauksen jälkeen laboratorioanalyysiin (Taulukko 2.1).



Kuva 2.1. Mittauslaitteisto.

Mittausten tuloksena saatiin jokaisesta näytteestä 364*640 pikseliä oleva kuva, joka sisälsi 224 kanavaa. Ensimmäisenä kuvat tuotiin Mathworksin Matlab-laskentaympäristöön. Tämän jälkeen kuvista poistettiin ylimääräinen sisältö (näyteastioiden reunat yms.). Laskennassa kuvien datamäärää täytyi pienentää, kuitenkin niin että näytteestä on laskennassa mahdollisimman kattava otos. Laskennassa käytettiin 20*20 pikseliä kokoisia kuvia, joiden tarkistettiin sisältävän oleellisen informaation näytteestä.

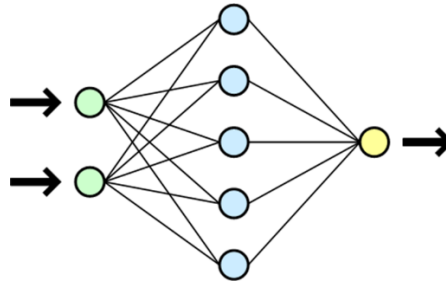
Taulukko 2.1. Laboratorioanalyysin tulokset, ylemmässä taulukossa vanhennuskokeen ja alemmassa taulukossa tuoreiden näytteiden tulokset.

PVM	kello	TVN-pitoisuus	PVM	kello	Kuiva-aine	Tuhka	Raakavalkuainen	Raakasva	Hiilihydraatit	pH
19.3.2019	17:00	0,50 %	19.3.2019	17:00	31,3 %	2,8 %	13,5 %	12,2 %	2,9 %	6,3
19.3.2019	20:00	0,50 %	19.3.2019	20:00	34,3 %	5,0 %	12,2 %	15,7 %	1,4 %	6,4
19.3.2019	23:00	0,40 %	19.3.2019	23:00	31,8 %	3,7 %	14,2 %	14,0 %	0,0 %	6,3
20.3.2019	2:00	0,70 %	20.3.2019	2:00	30,4 %	3,5 %	14,0 %	12,8 %	0,2 %	6,0
20.3.2019	5:00	0,80 %	20.3.2019	5:00	33,6 %	3,9 %	13,9 %	14,2 %	1,6 %	6,1
20.3.2019	8:00	0,70 %	20.3.2019	8:00	34,4 %	4,5 %	14,1 %	14,7 %	1,0 %	6,2
20.3.2019	11:00	1,30 %	20.3.2019	11:00	34,7 %	4,2 %	12,8 %	16,8 %	1,0 %	5,9
20.3.2019	14:00	1,00 %	20.3.2019	14:00	33,2 %	5,1 %	15,5 %	12,6 %	0,0 %	6,3
20.3.2019	17:00	1,40 %	20.3.2019	17:00	34,5 %	5,4 %	15,8 %	11,9 %	1,3 %	6,2
20.3.2019	20:00	1,40 %	20.3.2019	20:00	33,0 %	5,6 %	13,6 %	12,8 %	1,0 %	6,3
20.3.2019	23:00	1,40 %	20.3.2019	23:00	42,3 %	4,9 %	14,1 %	23,3 %	0,0 %	6,5
21.3.2019	2:00	2,90 %	21.3.2019	2:00	31,3 %	3,6 %	14,8 %	12,9 %	0,0 %	6,3
PVM	kello	TVN-pitoisuus	PVM	kello						
12.4.2019	17:00	0,90 %	12.4.2019	17:00	25,0 %	1,7 %	11,9 %	9,9 %	1,5 %	6,0
12.4.2019	20:00	0,60 %	12.4.2019	20:00	28,2 %	2,4 %	13,3 %	11,4 %	1,2 %	6,0
12.4.2019	23:00	0,80 %	12.4.2019	23:00	29,5 %	2,6 %	11,7 %	12,7 %	2,5 %	6,1
13.4.2019	2:00	0,50 %	13.4.2019	2:00	32,0 %	3,7 %	16,3 %	12,0 %	0,0 %	6,4
13.4.2019	5:00	0,90 %	13.4.2019	5:00	29,7 %	3,2 %	13,3 %	10,2 %	3,1 %	5,9
13.4.2019	8:00	1,90 %	13.4.2019	8:00	26,9 %	2,0 %	12,4 %	10,3 %	2,2 %	6,1
13.4.2019	11:00	2,30 %	13.4.2019	11:00	29,1 %	2,5 %	13,3 %	11,5 %	1,8 %	5,9
13.4.2019	14:00	2,70 %	13.4.2019	14:00	27,9 %	1,9 %	12,0 %	11,6 %	2,4 %	6,1
13.4.2019	17:00	2,30 %	13.4.2019	17:00	29,0 %	3,6 %	13,2 %	10,6 %	1,6 %	6,1
13.4.2019	20:00	3,40 %	13.4.2019	20:00	27,5 %	2,5 %	12,9 %	10,6 %	1,5 %	6,1
13.4.2019	23:00	3,70 %	13.4.2019	23:00	30,4 %	2,0 %	12,0 %	15,0 %	1,4 %	6,1
14.4.2019	2:00	4,50 %	14.4.2019	2:00	27,4 %	3,4 %	13,3 %	9,3 %	1,5 %	6,1
NÄYTE	Kuiva-aine	Tuhka	Proteiini	Rasva	Hiilihydraatit	pH	TVN (kokonaistypestä)			
Rauma 1	27,9 %	2,1 %	10,6 %	14,3 %	0,9 %	6,5	0,8 %			
Rauma 2	25,5 %	1,9 %	12,0 %	10,3 %	1,4 %	6,5	0,6 %			
Rauma 3	25,1 %	3,0 %	13,4 %	8,7 %	0,0 %	6,3	0,5 %			
Rauma 4	25,4 %	2,8 %	11,9 %	10,1 %	0,6 %	6,7	0,9 %			
Rauma 5	26,6 %	2,4 %	13,0 %	9,8 %	1,4 %	6,5	0,5 %			
Rauma 6	25,3 %	3,7 %	11,6 %	9,9 %	0,0 %	6,8	0,3 %			
Rauma 7	23,8 %	4,1 %	12,3 %	7,5 %	0,0 %	6,8	0,5 %			
Rauma 8	25,9 %	2,5 %	12,9 %	10,3 %	0,2 %	6,2	0,5 %			
Rauma 9	26,7 %	2,6 %	13,9 %	8,8 %	1,3 %	6,2	0,4 %			
Rauma 10	23,6 %	3,4 %	12,7 %	6,7 %	0,8 %	6,6	0,5 %			
Rauma 11	24,2 %	3,1 %	12,0 %	7,6 %	1,6 %	6,6	0,7 %			
Rauma 12	25,7 %	2,7 %	12,7 %	10,3 %	0,0 %	6,5	0,7 %			
Rauma 13	29,6 %	2,3 %	11,6 %	14,9 %	0,9 %	6,7	0,4 %			
Rauma 14	30,0 %	4,4 %	11,6 %	11,8 %	2,2 %	6,8	0,5 %			
Rauma 15	24,5 %	2,3 %	12,1 %	8,5 %	1,7 %	6,3	0,7 %			
NÄYTE	Kuiva-aine	Tuhka	Proteiini	Rasva	Hiilihydraatit	pH	TVN (kokonaistypestä)			
Nurmo 1	25,8 %	1,0 %	11,8 %	11,5 %	1,5 %	6,3	1,2 %			
Nurmo 2	29,4 %	1,8 %	12,0 %	14,0 %	1,7 %	6,2	0,9 %			
Nurmo 3	25,1 %	1,0 %	11,9 %	10,4 %	1,8 %	6,1	3,0 %			
Nurmo 4	27,7 %	1,0 %	11,5 %	14,0 %	1,2 %	6,2	2,8 %			
Nurmo 5	31,0 %	1,2 %	11,2 %	16,0 %	2,5 %	6,1	2,1 %			
Nurmo 6	28,3 %	0,8 %	11,0 %	14,6 %	1,9 %	6,2	3,1 %			
Nurmo 7	30,0 %	2,2 %	10,6 %	16,1 %	1,1 %	6,3	1,0 %			
Nurmo 8	27,9 %	2,3 %	11,2 %	13,0 %	1,5 %	6,2	1,8 %			
Nurmo 9	29,5 %	1,8 %	12,0 %	14,2 %	1,7 %	6,1	0,9 %			
Nurmo 10	27,5 %	1,1 %	11,7 %	13,3 %	1,4 %	6,3	1,2 %			
Nurmo 11	29,1 %	2,6 %	14,7 %	10,9 %	1,0 %	6,1	0,7 %			
Nurmo 12										
Nurmo 13	26,2 %	1,3 %	12,1 %	10,9 %	2,0 %	6,1	1,2 %			
Nurmo 14	28,6 %	2,5 %	12,2 %	13,5 %	0,4 %	6,4	0,6 %			
Nurmo 15	26,0 %	1,4 %	11,1 %	11,4 %	2,1 %	6,2	1,1 %			

2.1 Neuroverkkojen käyttö

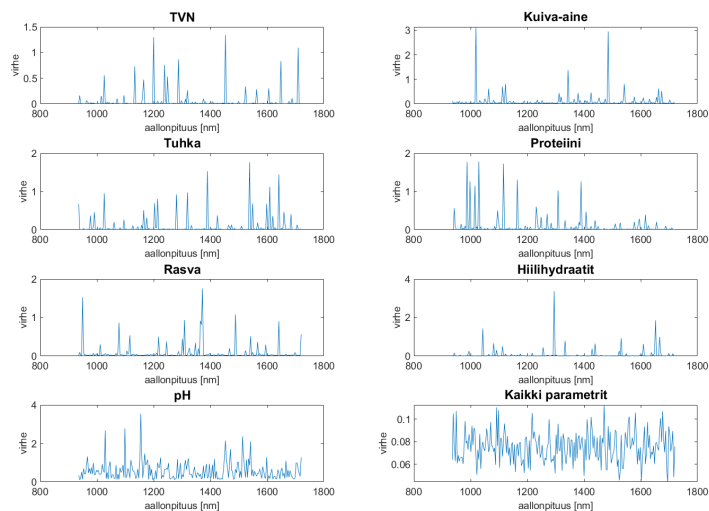
Seuraavaksi tarkoituksena oli selvittää, onko hyperspektrikuvien ja laboratorioanalyysin tulosten välillä riippuvuus. Tähän tarkoitukseen käytettiin neuroverkkoja. Neuroverkko on laskentamalli, joka perustuu yhdistävään laskentaan. Neuroverkko koostuu neuroneista, jotka ovat toisiinsa yhdistettyjä tietojenkäsittely-yksiköitä. Neuroneita voi

olla useampi kerros, rinnakkaisten neuronien määrää voidaan säätää jne. Neuronien sisältämien painokertoimien ja matemaattisten funktioiden avulla muodostetaan verkko, jonka avulla voidaan ratkaista monimutkaisiakin riippuvuussuhteita erilaisten datojen välillä.



Kuva 2.2. Neuroverkon perusrakenne. Neuroverkon sisääntuloina ovat tässä tutkimuksessa hyperspektrikuvat ja ulostulona laboratorioanalyysin tulokset. Kuva: Dake/Mysid, CC1.

Neuroverkkoa muodostettaessa käytettiin kahta eri tyyppistä ratkaisua. Ensimmäisessä ratkaisussa kuvan sisältämästä informaatiosta laskettiin kanavakohtainen mediaaniarvo, joka syötettiin neuroverkkoon. Toisessa ratkaisutavassa koko $20 \times 20 \times 224$ kuva syötettiin ensin konvoluutioverkkoon, jonka jälkeen käytettiin neuroverkkoa. Konvoluutioverkon avulla kuvasta voidaan tunnistaa piirteitä, jotka sitten syötetään tavalliseen neuroverkkoon. Laskennan edetessä siirryttiin käyttämään mediaanimenetelmää, sillä konvoluutiomenetelmän tulokset eivät olleet merkittävästi parempia ja mediaanimenetelmä on huomattavasti laskentatehokkaampi, mikä mahdollisti tilastollisen laskennan. Kummassakin tapauksessa käytettiin Matlabin Deep learning toolboxista löytyviä funktioita. Kuvassa 2.3 ja taulukossa 2.2 on esitetty merkittävimmät kanavat kunkin parametrin tapauksessa. Tulos on laskettu jättämällä kanava kerrallaan pois laskennasta ja katsottu kuinka suuri virhe on verrattuna laskentatulokseen, jossa kaikki kanavat ovat mukana. Yksittäisille parametreille löytyy selviä merkittäviä kanavia, mutta kaikkien parametrien ollessa laskennassa mukana kanavien tärkeys on merkittävä koko taajuusalueella.

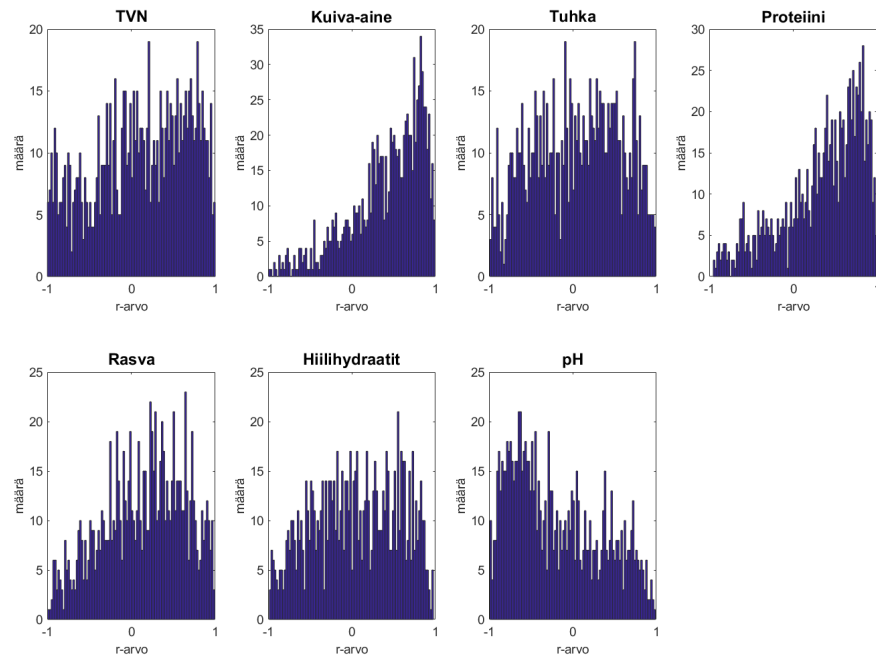


Kuva 2.3. Merkittävimmät kanavat.

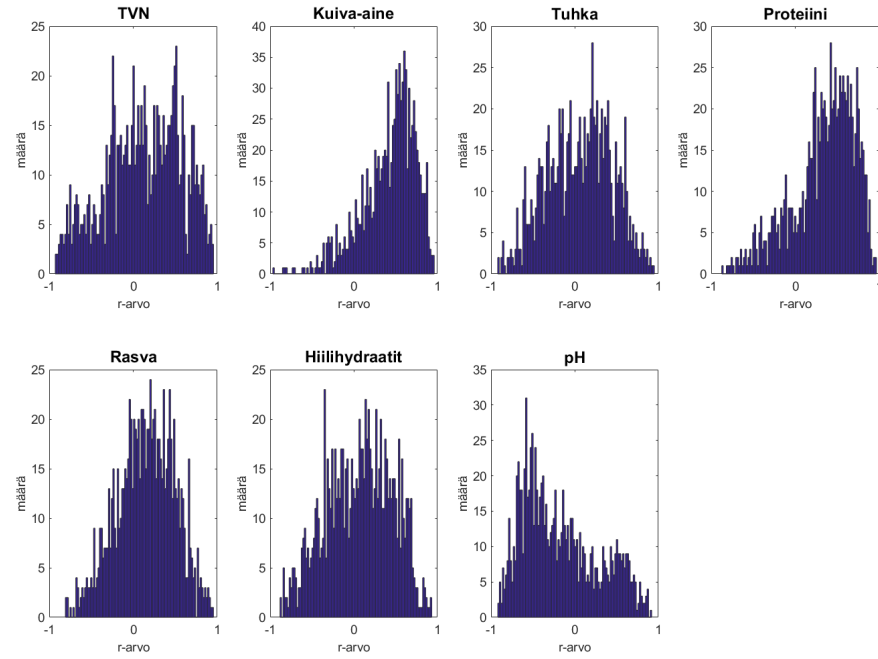
Taulukko 2.2. Viisi merkitsevintä kanavaa ja vastaava aallonpituus [nm] kullekin parametrille.

TVN	77 (1200)	102 (1288)	149 (1453)	204 (1648)	221 (1709)
Kuiva-aine	25 (1019)	55 (1123)	118 (1344)	158 (1485)	174 (1542)
Tuhka	111 (1319)	131 (1390)	173 (1538)	193 (1609)	202 (1642)
Proteiini	16 (988)	19 (998)	28 (1029)	53 (1116)	67 (1165)
Rasva	5 (949)	108 (1309)	124 (1365)	126 (1372)	159 (1489)
Hiilihydraatit	32 (1043)	104 (1295)	171 (1531)	205 (1652)	209 (1667)
pH	28 (1029)	48 (1099)	64 (1154)	149 (1453)	166 (1513)

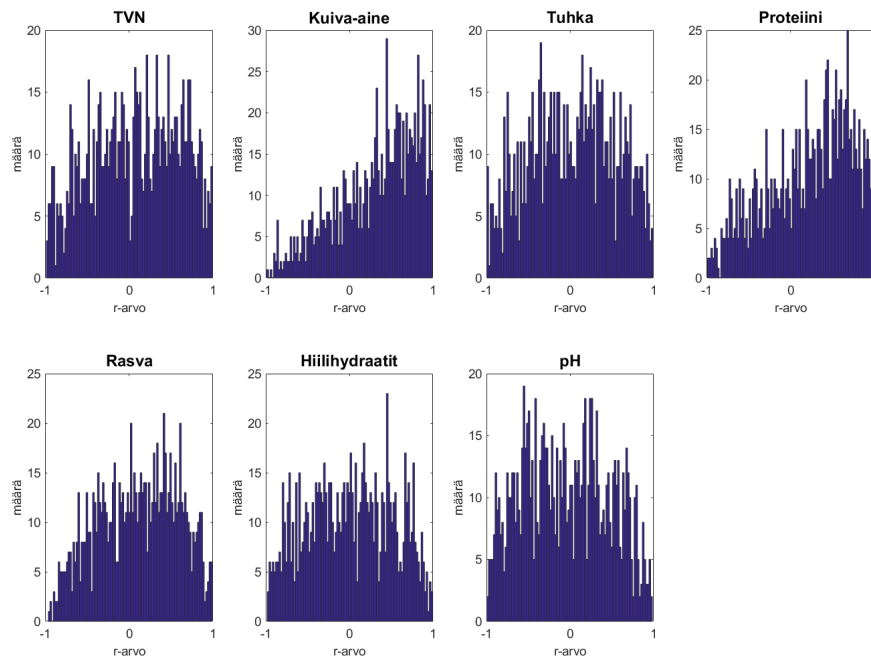
Tulokset on ilmoitettu käyttäen Pearsonin korrelaatiokerrointa (r), joka ilmaisee kahden muuttujan välisen lineaarisen riippuvuuden suuruuden. Arvo vaihtelee välillä $-1 \dots +1$. Mitä lähempänä arvo on ääripäitä -1 ja $+1$ sitä suurempi on muuttujien välinen riippuvuus. Jos arvo on lähellä nollaa, on riippuvuus vähäinen. Negatiivinen korrelaatio ilmaisee sitä, että jos toisen muuttujan arvo kasvaa niin toisen laskee. Positiivisen korrelaation tapauksessa molemmat kasvavat. Korrelaation katsotaan olevan merkitsevä, jos arvo on suurempi kuin $0,5$ tai $-0,5$. Koska analysoitavien näytteiden määrä oli alhainen, tarkasteltiin korrelaatiokerrointa tilastollisesti. Tämä tapahtui ajamalla ohjelmakoodi 1000 kertaa niin, että neuroverkon rakentamiseen käytettävä opetus-, validointi ja testausdata vaihtelivat satunnaisesti. Tulokset on esitetty kuvissa 2.4-2.6 histogrammimuodossa, jossa tulokset on jaettu 100 luokkaan. Kuvasta voidaan todeta, että korrelaatio löytyy selvimmin kolmella parametrilla: kuiva-aine, proteiini ja pH. Myös TVN antaa viitteitä riippuvuudesta. Muilla parametreilla korrelaatiota ei ole havaittavissa niin selvästi.



Kuva 2.4. Parametrien r-arvot histogrammeina (90 % opetusdata, 10 % testausdata).



Kuva 2.5. Parametrien r-arvot histogrammeina (80 % opetusdata, 20 % testausdata).



Kuva 2.6. Parametrien r-arvot histogrammeina (90 % opetusdata, 10 % testausdata, 5 merkittävintä kanavaa kuvan 3 perusteella).

Taulukko 2.3. Ennustearvojen ja laboratoriotulosten välinen erotus laskettuna opettamalla neuroverkko 1000 kertaa opetusdatan ja testidatan vaihdella satunnaisesti. Keskiarvoihin verrattuna varianssit ovat verrattain suuria. Varianssien suuruus osaltaan indikoi testinäytteiden vähyyttä.

90 % opetusdata, 10 % testausdata							
	TVN	kuiva- aine	tuhka	proteiini	rasva	hiilihydraatit	pH
mediaani	-0.02	0.14	0.24	0.06	0.31	-0.17	0.01
keskiarvo	1.13	-1.13	0.03	-1.74	-4.11	1.36	0.57
variassi	2.13e+03	644.96	1.19e+03	2.55e+03	4.84e+03	1.14e+03	1.46e+03

80 % opetusdata, 20 % testausdata							
	TVN	kuiva- aine	tuhka	proteiini	rasva	hiilihydraatit	pH
mediaani	0.16	0.32	0.08	-0.17	0.52	-0.06	-0.14
keskiarvo	2.10	-0.27	1.12	-1.33	-1.25	-2.73	-3.06
variassi	2.50e+03	734.67	522.44	2.25e+03	1.11e+03	2.43e+03	1.51e+03

90 % opetusdata, 10 % testausdata, 5 merkitsevintä kanavaa							
	TVN	kuiva- aine	tuhka	proteiini	rasva	hiilihydraatit	pH
mediaani	-0.12	-0.29	-0.09	-0.52	0.07	-0.14	-0.07
keskiarvo	-0.42	-0.25	-0.11	-0.54	-0.09	-0.03	-0.12
variassi	25.64	68.36	14.98	75.27	29.37	40.03	56.47

Johtopäätöksenä tuloksista voidaan todeta, että mediaanimenetelmällä merkitseviä korrelaatioita löytyy osasta parametreja (kuiva-aine, proteiini ja pH). Näytemäärän vähyyks aiheutti haasteita laskennassa ja suuremmalla näytemäärällä tulokset olisivat luotettavampia. Tämä näkyy etenkin taulukon 2.3 varianssien suuruudessa. Kuvien 2.4-2.6 r-arvo-histogrammien perusteella voidaan päätellä suuntaa antavasti mitä parametreja mahdollisesti kannattaa yrittää tunnistaa. Tilannetta parantaisi ainakin 200 lisänäytteen saaminen neuroverkon opetukseen. Lisäksi haastetta tunnistukseen aiheuttaa raaka-aineen epähomogeenisuus.

2.2 Lineaarinen monimuuttujaregressio

Neuroverkkojen lisäksi hyperspektrin ja laboratoriotulosten välille kokeiltiin suoraa lineaarista korrelaatiota. Kyseessä on sama idea kuin suoran sovituksessa pistejoukkoon funktiolla:

$$A \cdot x = b \quad (2.1)$$

Mistä selvitetään pistejoukon A ja lopputuloksen b avulla x :lle parametrit. Nyt kyseessä on 224 kanavaa sisältävä hyperspektrimittaus jokaiselle 54 laboratoriomittaukselle. Näin ollen A -matriisin koko on 54×224 koostuen hyperspektri-arvoista, ja b käsittää 54×7 laboratoriossa tehtyä mittausarvoa, jotka ovat. Hyperspektrimittaukset ovat samat kuin neuroverkko-osiossa esitellyt mediaanikäsitellyt mittaukset, jotka ovat siis TVN, kuiva-aine, tuhka, proteiini, rasva, hiilihydraatit ja pH.

Regressiosovitus tehtiin Matlabin stepwiselm-funktiolla. Funktion minimointikriteerinä oli virheen pienin neliösumma, ja mikäli yksittäinen kanava F -statistiikan avulla mitattuna alitti p -arvoltaan 0.01, niin kyseinen kanava lisättiin mukaan yhtälöön. Tulokset regressiosovituksesta on esitetty taulukossa 3. Spektrikanavien kertoimet on esitetty liitteessä 2.

Taulukko 2.4. Lineaarisen regressiosovituksen tulos

Laboratoriomittaus	Spektrikanavien paras lineaarinen regressio	Selittää datasta
TVN	$y \sim 1 + x_{23} + x_{42} + x_{205} + x_{206}$	54.9%
Kuiva-aine	$y \sim 1 + x_{121} + x_{123} + x_{125} + x_{221}$	62.6%
Tuhka	$y \sim 1 + x_{12} + x_{54} + x_{222}$	45.3%
Proteiini	$y \sim 1 + x_{17} + x_{222} + x_{12} \cdot x_{15}$	61.7%
Rasva	$y \sim 1 + x_1 + x_{98}$	12.1%
Hiilihydraatit	$y \sim 1$	-
pH	$y \sim 1 + x_1$	31.4%

Taulukosta 2.4 voi nähdä kaksi asiaa. Ensimmäinen on se, että merkitsevimmät spektrikanavat eivät ole samoja millään mitatulla elementillä. Toiseksi, esimerkiksi hiilihydraateilla vakiotermin esittäminen muuttujana (ts. kanavien vähyys) voi indikoida myös voimakkaan epälineaarisuuden omaavaa riippuvuutta, mikä ei onnistu lineaarisen sovituksen avulla. Tämä puoltaa koneoppimismenetelmien kokeilua isommalla testi- ja mittausaineistolla.

LIITE 1: ENERGIATASE

Koodi 1:

Sulatin_energiatase-koodi (sulatin_energiatase.m)

Alla on Matlab toteutus sulatin_energiatase.m simulaatiokoodista

```
function [Ews,Ehw,Em]=sulatin_energiatase(P,P2,T1,T2)
%6.9.2019 Jari Turunen, Tampereen yliopisto
a=0.83; % sulattimen höyryventtiilin asento välillä 0...1
PDOUT_2307_PIC1
D=0.2; %hönkäputken sisähalkaisija (m) joko 200 mm tai 250 mm
%P=4.6; % 2307_PT01 tieto (päähöyryn paine) (bar) varmistettu Rauli
Prunnialta 25.9.2019
%P2=-5; % 2307_PT02 hönkähöyrytieto mbar varmistettu Rauli
Prunnialta 25.9.2019
%T1=20; % 2307_TT01 lihamassan input lämpötila, varmistettu Rauli
Prunnialta 25.9.2019
%T2=80; % 2307_TT03 lihamassan output lämpötila, -,,-
mmv=7500; % tuotteen massavirta jostakin kairatiedoista (kg/h)
Cpm=3.22; % tuotteen ominaislämpökapasiteetti kJ/kg*K
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
T=kyllaisen_hoyryn_paine_lamportila(P); %Bar to dC
h=vesihoyryn_entalpia(T,P); %kJ/kg höyryn ominaisentalpia, saadaan
taulukosta, mutta miten lämpötila arvioidaan
m=hoyrynpaine_massavirraksi(a,P); %kg/h
%Höyryn energia
Qws=m*h; %kJ/h=kW/s/h
Qws=Qws*3600; %kW/s/h = kWh/s*(s/h)=kW
Ews=Qws*1; %kJ/s*h = kW*h=kWh, 1 tunti
%Hönkähöyryn energia
hv=vesihoyryn_entalpia(98,P2/1000); %mbar to bar, hv=kJ/kg
mv=honkahoyryn_massavirta(P2,D); %kg/h
Qhw=mv*hv; %kJ/h=kWh/s
Qhw=Qhw*3600; % (kWh/s)*(s/h) = kW
Ehw=Qhw*1; %kJ/s*h =kWh 1 tunti
%tuotteeseen sitoutunut energia
Qm=mmv*Cpm*(T2-T1); %Teho (kg/h)*(kJ/(kg*K))*K = kJ/h
Qm=Qm*3600; %kJ/s/h = kWh/s*(s/h)=kW
Em=Qm*1; %kJ/s*h =kWh 1 tunti
[h hv], [m mv]
[Ews Ehw Em] % Nämä tiedot talteen!!!!
Erotus=Ews-(Ehw+Em)
'Erotusprosentti päähöyryn energiaan verrattuna'
Erotusprosentti=Erotus/Ews*100
end
```

Koodi 2:

Aliohjelma hoyrynpaine_massavirraksi.m. Koodissa se on sisällytetty samaan tiedostoon sulatin_energiatase.m kanssa. Höyrynpaineesta massavirraksi on toteutettu Matti Lehtisen antamien kaavojen avulla.

```

function m=hoyrynpaine_massavirraksi(a,p)
% m [kg/h]
% Honkajoki broilerlaitoksen sulattimen ja kuivaimen höyrylaskel-
mat.pdf
default_hoyry=8; %bar
delta_p=default_hoyry-p;
if delta_p<0
    delta_p=0;
end
if a<0.1
    m=0;
else
    if delta_p<1
        m = 4740*a^3-5080*a^2+2491*a-214;
    elseif delta_p>=1&&delta_p<1.5
        m = 6449*a^3-6912*a^2+43291*a-291;
    elseif delta_p>=1.5&&delta_p<2
        m = 7569*a^3-8112*a^2+3863*a-342;
    elseif delta_p>=2&&delta_p<2.5
        m = 8345*a^3-8944*a^2+4259*a-377;
    else %delta_p>2.5
        m = 9296*a^3-9963*a^2+4744*a-420;
    end
end
end
end

```

Koodi 3:

Ohessa ovat toisensa kumoavat parit kylläisen höyryn_lampotila_paine.m ja kylläisen_hoyryn_paine_lampotila.m. Konversion kaava on otettu Helsingin yliopiston ympäristöfysiikan luennoista

https://www.cs.helsinki.fi/physics/envphys/lecture_2

1.3 Saturation vapor pressure.

```

function P=kylläisen_hoyryn_lampotila_paine(T)
%6.9.2019 Jari Turunen, University of Tampere
T=T+273.15; %Celsius to Kelvin
A=77.34;
B=-7235;
C=-8.2;
D=0.005711;
P=exp(A+B/T+C*log(T)+D*T);
P=0.00001*P; %Pascals To Bars
end

```

Suoran käänteismuunnoksen johtaminen ei analyttisesti onnistunut, joten käänteismuunnos on toteutettu iteroimalla kylläisen_hoyryn_paine_lampotila.m alifunktiossa.

```

function T=kylläisen_hoyryn_paine_lampotila(P)
%6.9.2019 Jari Turunen, University of Tampere
%P bar
%T Celsius
%Iteroidaan 6 desimaaliin asti
ref_t=600;
vali=[10 0.5 0.01 0.0001 0.00001];

```

```

alku=[600 10 0.5 0.01 0.0001];
for i=1:5
for T1=ref_t-alku(i):vali(i):ref_t
    P1=alifunktio(T1);
    if P1>P
        ref_t=T1;
        break
    end
end
end
T=T1;
end

```

Koodi 4:

Tämä alifunktio.m on sisällytettävä samaan tiedostoon Kylläisen_hoyryn_paine_lamputila.m kanssa

```

function P=alifunktio(T)
T=T+273.15; %Celsius to Kelvin
A=77.34;
B=-7235;
C=-8.2;
D=0.005711;
P=exp(A+B/T+C*log(T)+D*T);
P=0.00001*P; %Bar
end

```

Koodi 5:

Vesihöyryn entalpia (vesihoyryn_entalpia.m) on laskettu Matti Lehtisen antamilla taulukoilla, sillä muutoksella, että taulukko on muunnettu kaavaksi.

```

function hw=vesihoyryn_entalpia(T,P)
%6.9.2019 Jari Turunen, University of Tampere
%T in Celsius
%hw=2501+1.84*T; %original
%P in Bar
hw=2480+1.97*T-P*5.25; %fitted to Matti Lehtinen's table (Honkajoki Oy)
%hw =kJ/kg

```

Koodi 6:

Viimeisenä alifunktiona on honkahoyryn_massavirta.m. Tässä alifunktiossa hönhöyryn energia lasketaan Bernoullin yhtälön avulla.

```

function mv=honkahoyryn_massavirta(P,D)
%6.9.2019 Jari Turunen, Tampere University
%D=hönkäputken halkaisija (m)
%P=paine mbar (alipainetta)
ny=0.1; %Skaalaus: 10% maksimivirtaamasta
r=D/2; %Diameter=2*radius
P=100*P; %millibar to Pascals
P=abs(P);
V=1.694; %m3/kg, 0 bar, 99 dC, https://www.ohio.edu/mechanical/thermo/property_tables/H2O/H2O_PresSat1.html

```

```

ro=1/V; %density kg/m3

qv=ny*pi*(r^2)*sqrt(2*P/ro); %Bernoulli max flow equation qv=m3/s
mv=qv*ro; %kg/s
mv=mv*3600; %seconds to hours (kg/s->kg/h)
end

```

Koodi 7:

Mat_file_handler.m on ohjelman kutsufunktio, mikä syöttää tarvittavat kanavat Matlab mat-tiedoista energiataseen laskentaan.

```

function mat_file_handler

%user input for the start date and time

input_date_start=input('Start date: (format: year-mm-dd)', 's');
input_time_start=input('Start time: (format: hh:mm:ss)', 's');

input_string_start=strcat(input_date_start,{' '},input_time_start);
input_datetime_start=datetime(input_string_start,'Input-
Format','yyyy-MM-dd HH:mm:ss');
input_posixtime_start=posixtime(input_datetime_start);

%user input for the end date and time

input_date_end=input('End date: (format: year-mm-dd)', 's');
input_time_end=input('End time: (format: hh:mm:ss)', 's');

input_string_end=strcat(input_date_end,{' '},input_time_end);
input_datetime_end=datetime(input_string_end,'InputFormat','yyyy-MM-
dd HH:mm:ss');
input_posixtime_end=posixtime(input_datetime_end);

%user input for the time interval

input_time_interval=input('Time interval: (in seconds)');

%load mat-file for machine number 2307
load S:\91401_Sigala\Honkajoki\Koodit\2307.mat arvo_all laite_all
ts_all
arvo_2307=arvo_all;
laite_2307=laite_all;
ts_2307=ts_all;
%load s:\91401_Sigala\Honkajoki\2307.mat aika arvo paiva sijainti

load S:\91401_Sigala\Honkajoki\Koodit\2303_counter.mat arvo_all
laite_all ts_all
arvo_2303=arvo_all;
laite_2303=laite_all;
ts_2303=ts_all;

%delete unnecessary chars from variables and transform date and time
to unixtime array

unixtime_array_2307=[];

for i=1:length(arvo_2307)
    str=convertCharsToStrings(ts_2307{i});
    str = erase(str,"T");
    str = erase(str,".000Z");

```

```

    apustr1 = extractBefore(str,11);
    apustr2 = extractAfter(str,10);
    apu=strcat(apustr1 ,{' '}, apustr2);
    apu=datetime(apu, 'InputFormat', 'yyyy-MM-dd HH:mm:ss');
    unixtime_array_2307(i)=posixtime(apu);
    str=[];apustr1=[];apustr2=[];apu=[];
end
save 2307_unixtime_array.mat unixtime_array_2307

unixtime_array_2303=[];

for i=1:length(arvo_2303)
    str =convertCharsToStrings(ts_2303{i});
    str = erase(str, "T");
    str = erase(str, ".000Z");
    apustr1 = extractBefore(str,11);
    apustr2 = extractAfter(str,10);
    apu=strcat(apustr1 ,{' '}, apustr2);
    apu=datetime(apu, 'InputFormat', 'yyyy-MM-dd HH:mm:ss');
    unixtime_array_2303(i)=posixtime(apu);
    str=[];apustr1=[];apustr2=[];apu=[];
end
save 2303_unixtime_array.mat unixtime_array_2303

%combine date and time to unixtime

    %P=4.6; 2307_PT01 tieto (päähöyryn paine)(bar)    varmistettu Rauli
Prunnilalta 25.9.2019
    %P2=-5; 2307_PT02 hönkähöyrytieto mbar          varmistettu Rauli
Prunnilalta 25.9.2019
    %T1=20;      % lihamassan input lämpötila
    %T2=80;      % 2307_TT05 lihamassan output lämpötila

indeksivektori_1=[];
indeksivektori_2=[];
indeksivektori_3=[];
indeksivektori_4=[];

%find P, P2, T1 and T2 from 2307-file

for i=1:length(arvo_2307)

    k1 = strfind(laite_2307{i}, '_PT1');
    k2 = strfind(laite_2307{i}, '_PT2');
    k3 = strfind(laite_2307{i}, '_TT5');
    %k4 = strfind(laite_2307{i}, '_TT5');

    if isempty(k1)

    else

        indeksivektori_1=[indeksivektori_1;i];

    end

    if isempty(k2)

    else

        indeksivektori_2=[indeksivektori_2;i];

    end
end

```

```

    if isempty(k3)
    else
        indeksivektori_3=[indeksivektori_3;i];
    end

end

for i=1:length(arvo_2303)

    k4 = strfind(laite_2303{i}, 'COUNTER_');

    if isempty(k4)
    else
        indeksivektori_4=[indeksivektori_4;i];
    end
end
save indeksivektorit.mat indeksivektori_1 indeksivektori_2 indeksivektori_3 indeksivektori_4
arvo_2307=cell2mat(arvo_2307);
arvo_2303=cell2mat(arvo_2303);

value_PT1=arvo_2307(indeksivektori_1);
time_PT1=unixtime_array_2307(indeksivektori_1);

value_PT2=arvo_2307(indeksivektori_2);
time_PT2=unixtime_array_2307(indeksivektori_2);

value_TT5=arvo_2307(indeksivektori_3);
time_TT5=unixtime_array_2307(indeksivektori_3);

value_COUNTER=arvo_2303(indeksivektori_4);
time_COUNTER=unixtime_array_2303(indeksivektori_4);

save arvovektorit.mat value_PT1 time_PT1 value_PT2 time_PT2 value_TT5
time_TT5 value_COUNTER time_COUNTER
arvo=[];

%Remove time values bigger than the end time and smaller than the
start
%time with the exception that before the start time the previous value
%is taken into account

value_PT1(time_PT1>input_posixtime_end)=[];
apu=(time_PT1<input_posixtime_start);
k=find(apu);
apu(k(end))=0;
value_PT1(apu)=[];
time_PT1(time_PT1>input_posixtime_end)=[];
time_PT1(apu)=[];

value_PT2(time_PT2>input_posixtime_end)=[];
apu=(time_PT2<input_posixtime_start);
k=find(apu);

```

```

apu(k(end))=0;
value_PT2(apu)=[];
time_PT2(time_PT2>input_posixtime_end)=[];
time_PT2(apu)=[];

value_TT5(time_TT5>input_posixtime_end)=[];
apu=(time_TT5<input_posixtime_start);
k=find(apu);
apu(k(end))=0;
value_TT5(apu)=[];
time_TT5(time_TT5>input_posixtime_end)=[];
time_TT5(apu)=[];

value_COUNTER(time_COUNTER>input_posixtime_end)=[];
apu=(time_COUNTER<input_posixtime_start);
k=find(apu);
if not isempty(k)
apu(k(end))=0;
value_COUNTER(apu)=[];
end
time_COUNTER(time_COUNTER>input_posixtime_end)=[];
time_COUNTER(apu)=[];

PT1_vektori=[];
PT2_vektori=[];
TT5_vektori=[];
COUNTER_vektori=[];
erotusvektori_1=[];
erotusvektori_2=[];
erotusvektori_3=[];
erotusvektori_4=[];

laskuri=0;

for j=input_posixtime_start:input_time_interval:input_posixtime_end
laskuri=laskuri+1;
apu_1=value_PT1;
apu_2=value_PT2;
apu_3=value_TT5;
apu_4=value_COUNTER;

erotusvektori_1=j-time_PT1;
apu_1(erotusvektori_1<0)=[];
erotusvektori_1(erotusvektori_1<0)=[];
[minimi_1,indeksi_1]=min(erotusvektori_1);
PT1_vektori(laskuri)=apu_1(indeksi_1);
erotusvektori_1=[];
apu_1=[];

erotusvektori_2=j-time_PT2;
apu_2(erotusvektori_2<0)=[];
erotusvektori_2(erotusvektori_2<0)=[];
[minimi_2,indeksi_2]=min(erotusvektori_2);
PT2_vektori(laskuri)=apu_2(indeksi_2);
erotusvektori_2=[];
apu_2=[];

erotusvektori_3=j-time_TT5;
apu_3(erotusvektori_3<0)=[];
erotusvektori_3(erotusvektori_3<0)=[];
[minimi_3,indeksi_3]=min(erotusvektori_3);

```

```

TT5_vektori(laskuri)=apu_3(indeksi_3);
erotusvektori_3=[];
apu_3=[];

erotusvektori_4=j-time_COUNTER;
apu_4(erotusvektori_4<0)=[];
erotusvektori_4(erotusvektori_4<0)=[];
[minimi_4,indeksi_4]=min(erotusvektori_4);
COUNTER_vektori(laskuri)=apu_4(indeksi_4);
erotusvektori_4=[];
apu_4=[];
end

save 2307_vektoritiedot.mat PT1_vektori PT2_vektori TT5_vektori COUN-
TER_vektori

Ews=[];
Ehw=[];
Em=[];
diff_COUNTER_vektori=[];

for kk=1:length(COUNTER_vektori)
    if kk==length(COUNTER_vektori)||kk==length(COUNTER_vektori)-
1||kk==length(COUNTER_vektori)-2||kk==length(COUNTER_vektori)-
3||kk==length(COUNTER_vektori)-4
        diff_COUNTER_vektori(kk)=1000*((COUNTER_vektori(kk)-COUN-
TER_vektori(kk-4))/(kk-(kk-4)));
    else
        diff_COUNTER_vektori(kk)=1000*((COUNTER_vektori(kk+4)-COUN-
TER_vektori(kk))/(kk+4-kk));
    end
end
save 2303_vektoritiedot.mat diff_COUNTER_vektori

for jj=1:length(PT1_vektori)
    [Ews(jj),Ehw(jj),Em(jj),Erotusprosentti(jj)]=sulatin_ener-
giatase(PT1_vektori(jj),PT2_vektori(jj),TT5_vektori(jj),diff_COUN-
TER_vektori(jj));
end

aikavektori=input_posixtime_start:input_time_interval:input_posix-
time_end;
save 2307_energiatiedot_7500.mat aikavektori Ews Ehw Em
%
figure (2)
hold on
plot(aikavektori,Ews)
plot(aikavektori,Ehw)
plot(aikavektori,Em)
legend('Ews Höyryyn energia','Ehw Hönkähöyryyn energia','Em Massan
energia')
hold off
figure (3)

plot(aikavektori,Erotusprosentti)
end

```


LIITE 2: HYPERSEKTRI

Neuroverkkoanalyysiin käytetty koodi:

```
function neuro_opetus_DNN_Honkajoki_GPU_all
%Jari Pohjola, Tampere University

for jjj=1:7 %loop through all output parameters

delete(gcf('nocreate'));
rng('shuffle');

input_directory='%path to input folder';
output_directory='%path to output folder';

data=[];
label=[];
laskuri=0;
laskuri2=0;

%load input data (median vectors of the hyperspectral images)

a=dir([input_directory '*.mat']);

for i=1:length(a)
    load([input_directory '\' a(i).name]);
    laskuri=laskuri+1;
    data(laskuri,:)=hypervector;
end

%load output data (laboratory results)

a=dir([output_directory '*.mat']);

for i=1:length(a)
    load([output_directory '\' a(i).name]);
    laskuri2=laskuri2+1;
    if jjj==7
        label(laskuri2,1:1)=output_vector(jjj);
    else
        label(laskuri2,1:1)=100*(output_vector(jjj));
    end
end

%create training, validation and test data

[n,m]=size(data);
[trainInd,valInd,testInd] = dividerand(n,0.65,0.15,0.2);

x_train=data(trainInd,:);
x_val=data(valInd,:);
x_test=data(testInd,:);
y_train=label(trainInd,:);
y_val=label(valInd,:);
y_test=label(testInd,:);
inputSize = 224;
numHiddenUnits = 300;
numResponses = 1;
```

```

%create the neural network

layers = [ ...
    sequenceInputLayer(inputSize)
    fullyConnectedLayer(10)
    reluLayer
    dropoutLayer(0.1)
    fullyConnectedLayer(10)
    reluLayer
    fullyConnectedLayer(numResponses)
    regressionLayer]

options = trainingOptions('adam',...
    'MaxEpochs',1000, ...
    'InitialLearnRate',0.0025,...
    'Shuffle','every-epoch',...
    'ValidationData',{x_val',y_val'},...
    'MiniBatchSize',14, ...
    'Plots','none',...
    'Verbose',true,...
    'VerboseFrequency',50,...
    'ExecutionEnvironment','GPU');
net = trainNetwork(x_train',y_train',layers,options);

YPred = predict(net,x_test');
YPred=YPred';
predictionError=[];

%calculate prediction error
for j=1: length(YPred)
    apu=sqrt(mean((y_test(j,:) - YPred(j,:)).^2));
    predictionError(j)=apu;
end
erri=mean(predictionError);

%calculate r-value

matt=cov(y_test,YPred)/(std(y_test)*std(YPred));
r=matt(1,2);

save(['DNN_net_honkajoki' num2str(jjj) '_mat'], 'net', 'erri', 'r');

end

end

```

Regressioanalyysin tulokset:

TVN

Linear regression model:

$$y \sim 1 + x23 + x42 + x205 + x206$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	2.1198	1.3759	1.5407	0.12996
x23	0.017259	0.0039679	4.3497	7.0785e-05
x42	-0.014256	0.0030059	-4.7427	1.9252e-05
x205	-0.27713	0.084731	-3.2707	0.0019894
x206	0.28561	0.088846	3.2147	0.0023369

Number of observations: 53, Error degrees of freedom: 48

Root Mean Squared Error: 0.694

R-squared: 0.549, Adjusted R-Squared: 0.511

F-statistic vs. constant model: 14.6, p-value = 7.26e-08

Kuiva-aine

Linear regression model:

$$y \sim 1 + x121 + x123 + x125 + x221$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	-145.27	22.498	-6.4571	5.0036e-08
x121	0.63848	0.13144	4.8575	1.3074e-05
x123	-1.1714	0.23827	-4.9162	1.0718e-05
x125	0.50283	0.11759	4.276	8.9992e-05
x221	0.84393	0.11093	7.6077	8.6664e-10

Number of observations: 53, Error degrees of freedom: 48

Root Mean Squared Error: 2.25

R-squared: 0.626, Adjusted R-Squared: 0.594

F-statistic vs. constant model: 20, p-value = 9.23e-10

Tuhka

Linear regression model:

$$y \sim 1 + x12 + x54 + x222$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	-55.802	9.2708	-6.0191	2.1869e-07
x12	-0.016367	0.0053122	-3.0811	0.0033793
x54	0.006453	0.0033397	1.9322	0.05913
x222	0.29131	0.046717	6.2357	1.0128e-07

Number of observations: 53, Error degrees of freedom: 49

Root Mean Squared Error: 0.925

R-squared: 0.453, Adjusted R-Squared: 0.419

F-statistic vs. constant model: 13.5, p-value = 1.51e-06

Proteini

Linear regression model:

$$y \sim 1 + x17 + x222 + x12 \cdot x15$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	-54.151	8.9921	-6.022	2.4927e-07
x12	-0.14747	0.040484	-3.6426	0.00067167
x15	0.228	0.074272	3.0697	0.0035532
x17	-0.081625	0.042294	-1.93	0.05966
x222	0.30806	0.04436	6.9444	9.9241e-09
x12:x15	-6.4915e-06	2.5544e-06	-2.5413	0.014402

Number of observations: 53, Error degrees of freedom: 47

Root Mean Squared Error: 0.839

R-squared: 0.617, Adjusted R-Squared: 0.576

F-statistic vs. constant model: 15.1, p-value = 7.63e-09

Rasva

Linear regression model:

$$y \sim 1 + x1 + x98$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	-42.362	21.914	-1.9331	0.058898
x1	0.24176	0.099522	2.4292	0.018766
x98	-0.0065595	0.003558	-1.8436	0.071175

Number of observations: 53, Error degrees of freedom: 50

Root Mean Squared Error: 2.7

R-squared: 0.121, Adjusted R-Squared: 0.0856

F-statistic vs. constant model: 3.43, p-value = 0.0401

Hiihhydraatit

mdl =

Linear regression model:

$$y \sim 1$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	1.2434	0.11148	11.154	2.0952e-15

Number of observations: 53, Error degrees of freedom: 52

Root Mean Squared Error: 0.812

pH

Linear regression model:

$$y \sim 1 + x_1$$

Estimated Coefficients:

	Estimate	SE	tStat	pValue
(Intercept)	9.7242	0.71402	13.619	1.2822e-18
x1	-0.013688	0.0028305	-4.836	1.261e-05

Number of observations: 53, Error degrees of freedom: 51

Root Mean Squared Error: 0.194

R-squared: 0.314, Adjusted R-Squared: 0.301

F-statistic vs. constant model: 23.4, p-value = 1.26e-05