

Korelasyon katsayısı (r)

- Açıklanabilen varyasyonun, açıklanamayan varyasyona oranı, korelasyon katsayısı olarak tanımlanır.

$$r = \frac{N \sum xy - \sum x \sum y}{\left[[N \sum x^2 - (\sum x)^2] [N \sum y^2 - (\sum y)^2] \right]^{1/2}}$$

- Eğer doğrusal eğri, grafik üzerindeki tüm noktalardan geçiyorsa, $r = 1$ olur. Bu durumda, açıklanabilen varyasyon, açıklanamayan varyasyona eşittir.
- Grafik üzerindeki noktalar doğrusal eğri üzerinden sapıyorsa, bu defa açıklanmayan varyasyon daha büyük olacak ve $r < 1$ olacaktır.
- **Regresyon analizinde hesaplanan korelasyon katsayısı ile, 2 değişken arasındaki ilişkinin var olup olmadığı test edilir. Bu ilişkinin yönü (artan veya azalan) ve gücü ölçülmüş olur.**
- “r” değeri, eğim değeri ile aynı işarete sahiptir ve 0 ile 1 arasında değişmektedir. “r” değeri verilirken, virgülden sonra en az 3 hane verilmesine dikkat edilmelidir.

- Eğer r değeri 0.8'den büyükse, 2 değişken arasında iyi bir ilişkinin olduğunu, buna karşın 0.5'den küçükse zayıf bir ilişkinin olduğu anlaşılır.
- $r = +1$ ise, x ile y arasında artan doğrusal bir ilişki vardır ve doğrusal eğri tüm noktalardan geçmektedir.
- $r = -1$ ise, x ile y arasında azalan doğrusal bir ilişki vardır ve doğrusal eğri tüm noktalardan geçmektedir.

Determinasyon katsayısı (R^2)

- Deneysel verilerin doğrusal bir eğriye ne kadar iyi uyduğunun en iyi ölçütü, regresyon analiz işleminde hesaplanmış “determinasyon katsayısıdır (R^2).”
- $R^2 = 1$ olması, deneysel verilerin kusursuz bir doğrusal eğri sağlandığının kanıtıdır.
- Ne kadar çok veri noktası varsa, R^2 'nin güvenilirliği o kadar yüksektir.

Determinasyon katsayısı (R^2)

- $R^2=0.85$ ise, y değişkenindeki toplam varyasyonun %85'i açıklanabilirken, %15'i açıklanamaz.
- **Regresyon analizinden yararlanarak, incelenen reaksiyonun “hangi reaksiyon derecesine uyduğuna” karar verilir.**
- R^2 değeri, açıklanabilen varyasyonun (SSR) toplam varyasyona (SST) oranı olarak tanımlanır ($R^2 = SSR / SST$).

- En küçük kareler yönteminde R^2 aşağıda verilen eşitlikten hesaplanır.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (Y_i - \hat{Y})^2}{\sum (Y_i - \tilde{Y})^2}$$

Burada:

Y_i : Deneysel olarak saptanmış değerler,

\hat{Y} : Regresyon eşitliğinden hesaplanmış değerler,

\tilde{Y} : Deneysel verilerin ortalaması.

- **Örnek 3** : Spektrofotometrik yöntemle yapılan bir askorbik asit tayini için gereksinim duyulan standart eğrinin belirlenmesi amacıyla, sürdürülen deneyde elde edilen veriler aşağıda verilen Tablo 3'ün ilk üç sütununda gösterilmiştir. Deneyde 7 farklı konsantrasyon seçilmiştir. Konsantrasyonlar (X_i) sütununda, absorbans farkları ($A_1 - A_2$) ise, Y_i sütununda gösterilmiştir. Buna göre, askorbik aside ait “standart eğriyi” tanımlayan eşitliği “en küçük kareler” yöntemiyle doğrusal regresyon analizi uygulayarak saptayınız.

Tablo 3 Askorbik asit kons.'u ile absorbands farkı arasındaki ilişki

Deney No (i)	Askorbik asit konsantrasyonu (mg/L) (Xi)	Ölçülen absorbans farkı (Yi)
1	4	0.0585
2	6	0.0870
3	8	0.1215
4	10	0.1520
5	15	0.2310
6	20	0.2935
7	25	0.3825

Deney No (i)	AA kons. (mg/L) (X_i)	Ölçülen absorbans farkı (Y_i)	(X_i)²	(Y_i)²	X_i Y_i
1	4	0.0585			
2	6	0.0870			
3	8	0.1215			
4	10	0.1520			
5	15	0.2310			
6	20	0.2935			
7	25	0.3825			
n =	$\Sigma X_i =$	$\Sigma Y_i =$	$\Sigma X_i^2 =$	$\Sigma Y_i^2 =$	$\Sigma (X_i Y_i) =$

Deney No (i)	AA kons. (mg/L) (Xi)	Ölçülen absorbans farkı (Yi)	(Xi)²	(Yi)²	Xi Yi
1	4	0.0585	16	3.4223 x 10 ⁻³	0.234
2	6	0.0870	36	7.569 x ⁻³	0.522
3	8	0.1215	64	0.0147	0.972
4	10	0.1520	100	0.0231	1.520
5	15	0.2310	225	0.0534	3.465
6	20	0.2935	400	0.0861	5.87
7	25	0.3825	625	0.1463	9.5625
n = 7	$\Sigma X_i = 88$	$\Sigma Y_i =$ 1.326	$\Sigma X_i^2 =$ 1466	$\Sigma Y_i^2 =$ 0.3346	$\Sigma (X_i Y_i) =$ 22.1455 ¹⁰

- a, b ve r hesaplanacak
- Standart eğriyi tanımlayan eşitlik verilecek

- “r” deęerinin 1’e yakın olması, askorbik asit konsantrasyonu ile absorbans farkı arasında artan ok iyi bir iliřkinin olduęunu gstermektedir. Yani, absorbans farkı arttıka askorbik asit konsantrasyonu da dzenli bir Őekilde artmaktadır.

- “Askorbik asit tayini için örnekle yürütülen bir deneyde eğer absorbands farkı $y = 0.16$ olarak saptanmışsa, bu farka eşdeğer askorbik asit miktarı; regresyon eğrisini tanımlayan eşitlikten aşağıdaki gibi hesaplanır:

$$y = 0.01522 x - 0.00194$$

- **Örnek 4 :** Örnek 2’de verilen verileri kullanarak; askorbik asit kaybına ait “doğrusal eğriyi” tanımlayan eşitliği “en küçük kareler” yöntemiyle doğrusal regresyon analizi uygulayarak saptayınız. Ayrıca, elde ettiğiniz eşitliği kullanarak “doğrusal eğriyi” çiziniz.

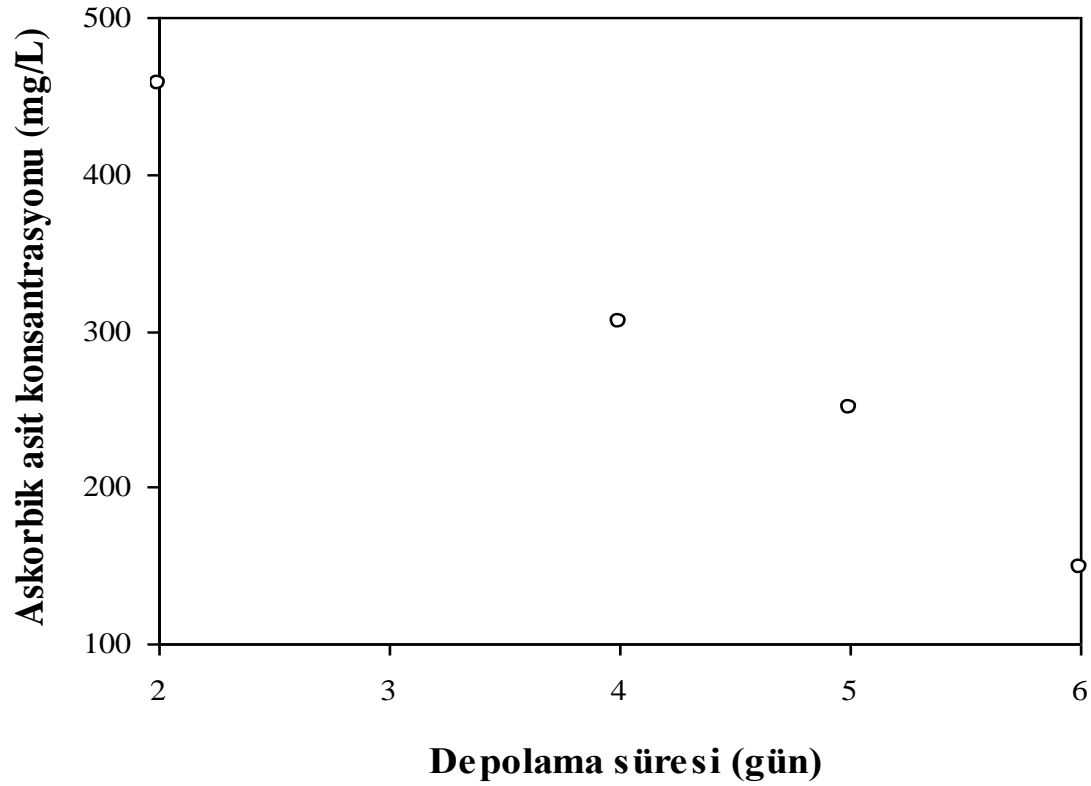
Tablo 4 Askorbik asidin parçalanmasına ilişkin deneysel verilerin “en küçük kareler” yöntemiyle regresyon analizi

- Tablo oluşturulacak

- a, b, r ve R^2 deęerleri hesaplanacak

- “r” deęerinin -1 'e yakın olması, askorbik asit konsantrasyonu ile depolama süresi arasında azalan çok iyi bir ilişkinin olduğunu göstermektedir. Yani, depolama süresine baęlı olarak askorbik asit miktarı düzenli bir şekilde azalmaktadır.
- R^2 deęerinin 1 'e yakın olması ise, deneysel verilerin doğrusal bir eğriye ne kadar iyi uyduğunu göstermektedir.

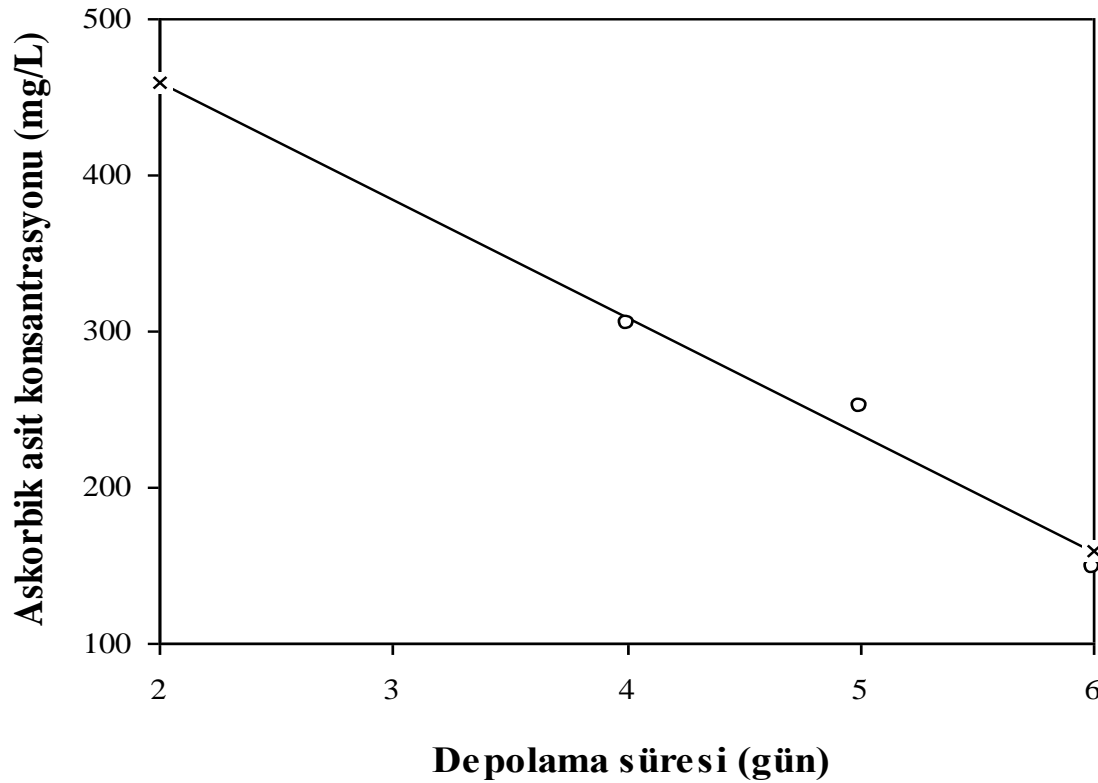
Verilerin grafiğe aktarılması



- Daha sonra “en büyük” ve “en küçük” x değerleri eşitlikte yerine konularak, bu “x” değerlerine karşılık gelen “düzeltilmiş” y değerleri hesaplanır.

$$y = -75.11 x + 609.49$$

Elde edilen bu deęerler grafięe iřlenerek, bu iki noktadan geęen regresyon eęrisi izilir (řekil 4)



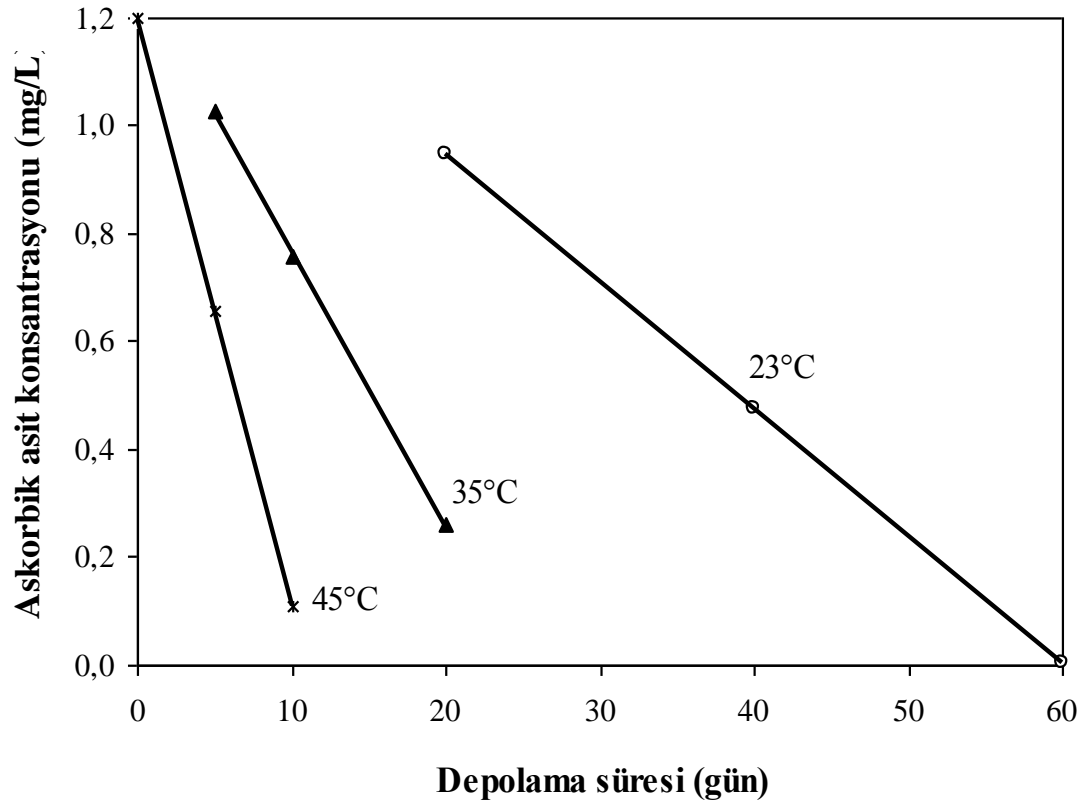
- Bilimsel çalışmaların sunumunda, sadece orijinal deney verileri grafikte gösterilmektedir. Regresyon eşitliğinden hesaplanan değerler ise, regresyon eğrisi üzerinde gösterilmez.

- **Örnek 5:** Portakal sularının çeşitli sıcaklıklarda depolanması sırasında askorbik asit degradasyonunun (parçalanmasının) incelendiği bir çalışmada (Nielsen et al. 1993), 3 farklı sıcaklıkta depolanan portakal sularında farklı sürelerde askorbik asit miktarları saptanmıştır. Sonuçlar Tablo 5’de verilmiştir. Askorbik asidin parçalanmasına ilişkin eğim, y-kesen, korelasyon katsayısı ve determinasyon katsayısı değerlerini “en küçük kareler yöntemiyle” doğrusal regresyon analizi uygulayarak saptayınız. Ayrıca, elde ettiğiniz eşitliği kullanarak “regresyon eğrisini” çiziniz. (Ödev)

Tablo 7 Farklı sıcaklıklarda depolanan portakal sularındaki askorbik asidin parçalanmasına ilişkin deneysel verilerin “en küçük kareler” yöntemiyle regresyon analizi ile değerlendirilmesi ile hesaplanan katsayılar

Sıcaklık (°C)	Eğim (a) (birim?)	y-kesen, b (birim?)	r	R ²
23	-0.0236	1.4200	1	1
35	-0.0510	1.2775	0.9997	0.9995
45	-0.1091	1.2002	1	1

Şekil 5 Farklı sıcaklıklarda depolanan portakal sularındaki askorbik asidin parçalanmasına ilişkin regresyon eğrileri



- **Örnek 6** : 50°C’de desülfirizasyon işlemi uygulanan kuru kayısılarda enzimatik olmayan esmerleşme reaksiyonları sonucunda oluşan esmer renkli pigment oluşumu 420 nm dalga boyunda absorban değerlerinin ölçülmesiyle belirlenmiştir (Tablo 8). Bu reaksiyona ilişkin eğim, y-kesen, korelasyon katsayısı ve determinasyon katsayısı değerlerini “en küçük kareler” yöntemiyle doğrusal regresyon analizi uygulayarak saptayınız. Ayrıca, elde ettiğiniz eşitliği kullanarak “doğrusal eğriyi” çiziniz.

a = 0.00077 (birim?)

b = 0.1405 (birim?)

r = 0.996

R² = 0.993

Regresyon yöntemi ile eğim ve y-kesen değerlerin hesaplanması

- Regresyon analizi için gerekli değerler deneysel verilerden hesaplanacak ve sonuçlar Tablo 11'de gösterilecektir.

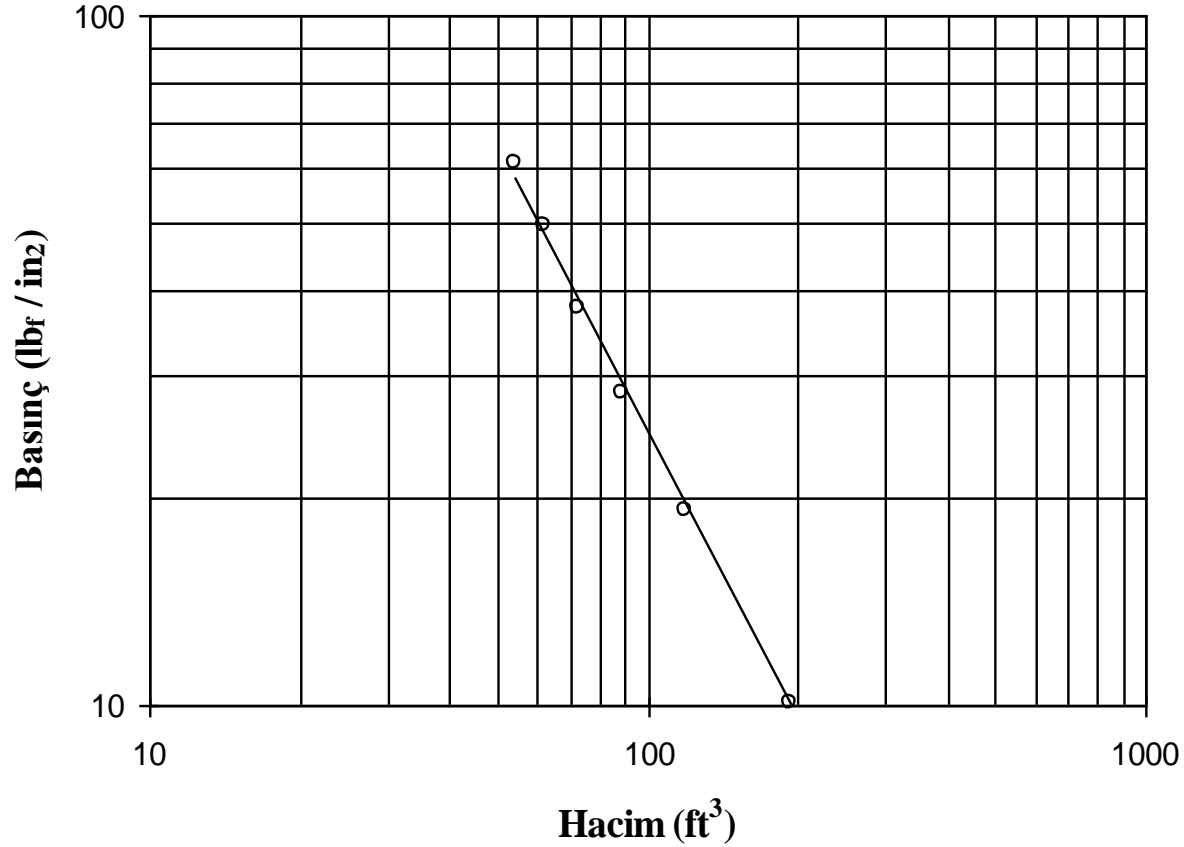
Tablo 11 Gerçek bir gazın adyabatik sıkıştırılması sırasında hacim-basınç arasındaki ilişkiye ilişkin deneysel verilerin en küçük kareler yöntemiyle regresyon analizi en

X	log X	(log X)²	Y	log Y	(log Y)²	(log X) (log Y)
	$\Sigma x =$	$\Sigma x^2 =$		$\Sigma y =$	$\Sigma y^2 =$	$\Sigma xy =$

- A, b, ve r değerleri hesaplanacak.
- Hesaplanan eğim ve y-kesen değerleri kullanılarak, gerçek bir gazın adyabatik sıkıştırılması sırasında hacim-basınç arasındaki ilişkiye ait eşitlik belirlenecektir.

- Deneysel veriler logaritmik ölçekli grafiğe aktarılmış ve “en büyük” ve “en küçük” “x” değerleri eşitlikte yerine konularak, “x” değerlerine karşılık gelen “düzeltilmiş y” değerleri hesaplanmıştır. Gerçek bir gazın adyabatik sıkıştırılması sırasında hacim-basınç arasındaki ilişkiye ait regresyon eğrisi aşağıda hesaplanan koordinatlar kullanılarak çizilmiştir (Şekil 8).

Şekil 8 Gerçek bir gazın adyabatik sıkıştırılması sırasında hacim-basınç arasındaki ilişkiyi tanımlayan regresyon eğrisi



Regresyon yöntemiyle y-kesen değerinin hesaplanması

- Regresyon eşitliğinden bulunan “log b” değerinin “anti log” u alınarak gerçek y-kesen değeri aşağıda verildiği gibi hesaplanır.

Hesapla

- Görüldüğü gibi, regresyon uygulamadan ve uygulayarak elde edilen y-kesen değerleri birbirine yakın değerlerdir. Bununla birlikte, en doğru y-kesen değeri, regresyon analiziyle hesaplanan y-kesen değeridir.

- Görüldüğü gibi, regresyon uygulamadan ve uygulayarak elde edilen y-kesen değerleri birbirine yakın değerlerdir. Bununla birlikte, en doğru y-kesen değeri, regresyon analiziyle hesaplanan y-kesen değeridir.

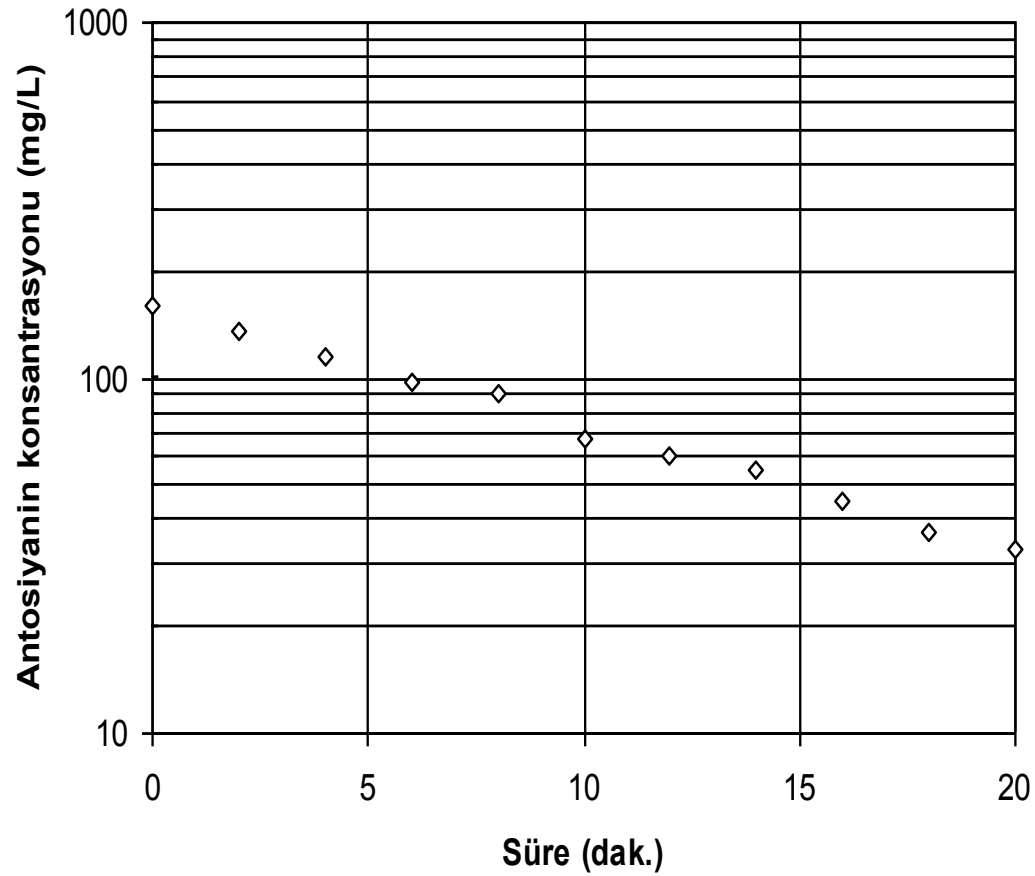
Deney verilerinin yarı-logaritmik grafik kağıdına işlenmesi

- Bu amaçla örnek bir soru düzenlenmiş ve çözümü aşağıda verilmiştir.

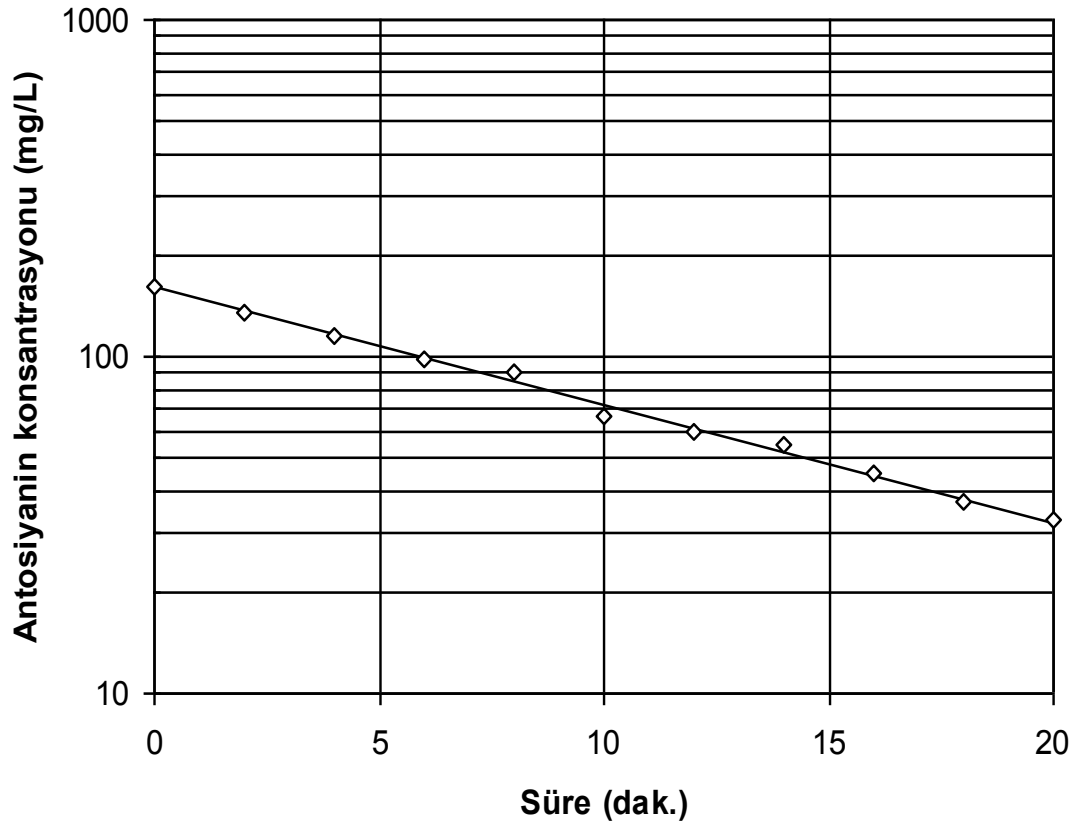
Deney verilerinin yarı-logaritmik grafik kağıdına işlenmesi

- **Örnek 13** : 160 mg/L düzeyinde antosiyanin içeren bir vişne suyu 80°C'de sabit sıcaklıkta ısıtılması süresince, belli aralıklarla antosiyanin kaybı izlenmiş ve deney sonuçları Tablo 11'de gösterilmiştir. Bu verileri yarı-logaritmik skalalı bir grafik kağıdına aktardıktan sonra, birimleri ile birlikte eğim ve y-kesen değerleri ile determinasyon katsayısını hesaplayınız.

Şekil 10 80°C'de ısıtılan vişne suyunda antosiyanin kaybı



Şekil 11 80°C'de ısıtılan vişne suyunda antosiyanin kaybına ilişkin regresyon eğrisi



- **Örnek 14** : M.O.'ların sayısının ikiye katlanma süresi (g) (generation time) m.o.'ların çoğalma hızının bir ölçütüdür. Ortamdaki canlı m.o.'ların başlangıç sayısının (N_0), “ t ” süre sonunda ulaştığı sayı aşağıdaki eksponansiyel (üssel) eşitlikle tanımlanmaktadır.

$$N = N_0 [2]^{t/g}$$

N_0 : Başlangıçtaki m.o. sayısı,

N : t süre sonundaki m.o. sayısı,

t : Süre,

G : Jenerasyon süresi.

