

Microsoft® Excel’de Monte Carlo Benzetimi: Gıda Bilimlerinde Kullanılan Doğrusal Olmayan Regresyon İçin Model Parametrelerinin Güven Aralıklarının Belirlenmesi

Sencer Buzrul  

Konya Gıda ve Tarım Üniversitesi, Gıda Mühendisliği Bölümü, Melikşah Mah. Beyşehir Cad. No: 9, 42080 Meram, Konya

Geliş Tarihi (Received): 03.12.2020, Kabul Tarihi (Accepted): 19.09.2021

✉ Yazışmalardan Sorumlu Yazar (Corresponding author): sencer.buzrul@gidatarim.edu.tr (S. Buzrul)

☎ 0 332 223 5360 📠 0 332 223 5490

ÖZ

Gıda bilimlerinde deneysel verileri tanımlamak için sıklıkla matematik modeller kullanılmaktadır. Bu modeller parametrelerine göre doğrusalsa doğrusal regresyon, değilse doğrusal olmayan regresyon kullanılır. Doğrusal regresyonun doğrusal olmayan regresyona göre uygulanması ve yorumlanması daha kolaydır. Excel kullanılarak uygulanan doğrusal regresyonda model parametreleri, bu parametrelerin standart hataları, güven aralıkları ve model uyum göstergeleri elde edilebilir. Öte yandan, yine Excel kullanılarak doğrusal olmayan regresyon yapmak mümkündür. Ancak, böyle bir durumda sadece model parametreleri ve model uyum göstergeleri hesaplanabilir. Yani, model parametrelerinin belirsizlikleri (standart hataları ya da güven aralıkları) elde edilemez. Oysa parametre belirsizlikleri eldeki veriler için bir modelin kullanılıp kullanılmayacağına önemli göstergelerinden biridir ve bunları elde edebilmek için doğrusal olmayan regresyon yapabilen ücretli yazılımlar kullanılabilir. Bir diğer alternatif ise hemen herkesin bilgisayarında yüklü olan Excel’de Monte Carlo (MC) benzetimi yapmaktır. Bu çalışmada bunun nasıl yapılacağı detaylı bir şekilde madde madde açıklanmıştır. Excel’de MC benzetimi yapılarak elde edilen parametre belirsizlikleri doğrusal olmayan regresyon yapabilen diğer ücretli yazılımlarla karşılaştırıldığında birbirlerine çok yakın değerler elde edildiği görülmüştür. Excel kullanımına aşina oldukça Excel’de MC benzetimi yapmak (rastgele veri üretimi, Çözücü aracının kullanımı, vd.) oldukça sıradan ve basit bir işlem olacak ve bu bilgiler gıda bilimlerinde farklı alanlarda (mikrobiyoloji, biyoteknoloji, temel işlemler vd.) çalışan birçok araştırmacı için fayda sağlayacaktır.

Anahtar kelimeler: Matematik modelleme, Model uydurma, Monte Carlo yöntemi, Excel

Monte Carlo Simulation in Microsoft® Excel: Confidence Intervals of Model Parameters for Non-Linear Regression used in Food Sciences

ABSTRACT

Mathematical models have been frequently used in food sciences to describe experimental data. Linear regression is used if the parameters of a model are linear; however, if a model is not linear with respect to its parameters non-linear regression should be used. Linear regression is easier to apply and interpret than the non-linear regression. Model parameters, standard errors and confidence intervals of these parameters, and goodness-of-fit indices can be obtained by applying linear regression in Excel. On the other hand, it is also possible to perform non-linear regression in Excel. However, only model parameters and goodness-of-fit indices can be calculated in this case. That is, uncertainties (standard errors or confidence intervals) of model parameters cannot be obtained. However, parameter uncertainties are one of the important indicators whether a model is used or not for the data being handled, and shareware that perform non-linear regression can be used to obtain them. Another alternative is to apply Monte Carlo (MC) simulation in Excel, which is installed on many personal computers. In this study, application of MC simulation in Excel was

explained step by step in details. It was observed that the values of the parameter uncertainties obtained by performing MC simulation in Excel were very close to those obtained by using any shareware. It will be an ordinary and simple process to perform MC simulation (random data generation, use of the Solver tool, etc.) in Excel as the users become familiar with the use of Excel, and this information would be beneficial for many researchers working in different fields of food science (microbiology, biotechnology, unit operations, etc.).

Keywords: Mathematical modeling, Model fit, Monte Carlo method, Excel

GİRİŞ

Gıda bilimlerinin içerisinde yer alan gıda mikrobiyolojisi, gıda kimyası ve gıda biyoteknolojisi gibi alanlarda matematik model ya da modeller kullanılarak verilerin tanımlanmaya çalışılması yaygın bir uygulamadır. Burada amaç mümkün olan en az parametreye sahip bir matematik model ile deneysel verileri tanımlamaktır.

Matematik modeller doğrusal ya da doğrusal olmayan modeller şeklinde ikiye ayrılır. Eğer bir modelde parametreler doğrusalsa doğrusal regresyon kullanılarak parametre değerleri elde edilebilir. Ancak, model parametreleri doğrusal değilse doğrusal olmayan regresyonun kullanılması gerekir.

Örneğin çok basit bir model olan $y = a \cdot x + b$ denklemini ele alalım. Burada x bağımsız değişken, y (x 'e bağımlı olduğu için) bağımlı değişken, a ve b ise model parametreleridir. Modeldeki her iki parametrede doğrusal olduğundan bu parametreleri elde etmek için doğrusal regresyon yeterli olacaktır. Ayrıca model bağımsız değişken x 'e göre de doğrusaldır dolayısıyla bu denklem grafik (x - y) üzerinde gösterildiğinde bir doğru elde edilir.

Şimdi yine çok basit bir model olan $y = x/A + B$ denklemi üstünden örnek verelim. Aynı şekilde x bağımsız değişken, y bağımlı değişken, A ve B ise model parametreleridir. Ancak, denklem A 'ya göre doğrusal değildir. (B 'ye göre doğrusaldır.) Dolayısıyla bu denklemin parametrelerini bulmak için doğrusal olmayan regresyon kullanılmalıdır. Bu denklem de grafik (x - y) üzerinde gösterildiğinde bir doğru elde edilir çünkü model x 'e göre doğrusaldır. Görüldüğü gibi iki modelde de grafik üzerinde doğru elde etmemize rağmen birinci model için doğrusal, ikinci model için doğrusal olmayan regresyon kullanılmalıdır.

Konunun iyice anlaşılabilmesi için bir örnek daha vermek faydalı olacaktır. Şöyle ki, $y = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$ modeli parametrelerine (a , b ve c 'ye) göre doğrusaldır ancak x 'e göre doğrusal değildir. Denklemin grafik üzerinde gösterimi sonucu bir eğri elde edilir fakat parametreleri elde etmek için doğrusal regresyon kullanılır. Yukarıdaki tüm örnekleri özetlemek gerekirse bir modelin grafik üzerinde doğru olarak gösterilmesi o model parametrelerini doğrusal regresyon kullanılarak hesaplanabileceğini göstermez. Farklı bir şekilde söylersek ikinci ya da üçüncü dereceden bir polinom ya da grafik üzerinde eğri olarak görülen bir modelin parametreleri doğrusal regresyonla hesaplanabilir. Özetle doğrusal modeller sadece düz çizgileri, doğrusal olmayan modeller ise sadece eğrileri tanımlamaz.

Excel günümüzde finanstan mühendisliğe kadar birçok alanda farklı amaçlar için kullanılmaktadır. Gıda bilimlerinde de Excel kullanımı yaygındır çünkü hemen hemen tüm bilgisayarlarda bu program yüklüdür. Excel kullanarak doğrusal regresyon analizi yapmak mümkündür. Şöyle ki, Excel'deki "veri çözümü" aracının içinde yer alan regresyon uygulaması ile (parametrelerine göre) doğrusal modellerin parametreleri kolaylıkla bulunabilir [1].

Öte yandan Excel'in içerisinde yüklü olan modellerden (parametresine göre doğrusal ve doğrusal olmayan modeller yer almaktadır) ve grafik üzerinde gösterimden de yararlanılarak veriler tanımlanabilir. Burada çoğu araştırmacının atladığı bazı hususlar vardır. Bu hususlar aşağıda kısaca sıralanmıştır. Excel'in içerisinde yüklü doğrusal veya doğrusal olmayan modeller için grafik üzerindeki gösterimde parametre değer/değerleri ve R^2 değeri elde edilebilir. Ancak, parametre değerlerinin belirsizlikleri (standart hataları veya güven aralıkları) ve model uyumunun diğer göstergeleri (örneğin ayarlı R^2 ve modelin standart hatası gibi) elde edilemez. Kısaca bahsetmek gerekirse örneğin bir modelde hız sabiti parametresini regresyon sonucu hesaplayarak 2 dakika^{-1} olarak ifade etmek pek bir şey ifade etmez çünkü regresyon sonucu elde edilen bu parametre güven aralıklarıyla örneğin $2 \pm 1.8 \text{ dakika}^{-1}$ ya da $2 \pm 0.2 \text{ dakika}^{-1}$ olabilir. İlkinde hız sabiti parametresinin belirsizlik aralığı geniş olup güvenilirliği düşük iken, ikincisi oldukça güvenilir bir tahmin sunmaktadır.

Birçok araştırmacı model uyumunu göstermek için R^2 değerinin yeterli olduğunu düşünür ancak bu doğru değildir. Bunun için R^2 değerinin yanı sıra farklı göstergeler de kullanılmalıdır. Bu göstergeleri doğrusal modeller için elde etmek için veri çözümü aracında yer alan regresyon uygulaması kullanılmalıdır. Excel'de doğrusal regresyonun kullanımı, model uyumu göstergeleri ve akla takılan diğer hususlar için Leylak ve ark.'nın [1] çalışması incelenebilir. Daha önemli bir konu Excel'in içinde yer alan doğrusal olmayan modellerin doğrusal hale dönüştürülmesi ve Excel'in bu modellere doğrusal olmayan regresyon yerine doğrusal regresyon uygulamasıdır. Excel'deki bu modelleri kullanan araştırmacılar çoğu zaman bunun farkında olmamaktadır ve elde ettikleri sonuçlar aslında olması gerekenden farklıdır. Yani parametre değerlerini doğrusal olmayan regresyon yerine doğrusal regresyon kullanarak buldukları için çoğu zaman sonuçlar yakın olmakla birlikte, aynı değildir. Bu konuyla ilgili olarak da Yurdakul ve ark.'nın [2] çalışması faydalı olabilir.

Doğrusal olmayan modeller için Excel'de "çözücü" aracı kullanılabilir ancak çözücü aracı kullanılarak sadece parametre değerleri elde edilir. Yani parametre

belirsizlikleri bulunmaz. Ancak, yukarıda da değindiğimiz gibi parametre belirsizliklerini elde etmek parametrelerin yorumlanabilir olmasını sağlayacaktır. Öte yandan doğrusal olmayan modeller için model uyumu göstergelerini (R^2 , ayarlı R^2 ve modelin standart hatası (RMSE)) Excel kullanarak hesaplamak oldukça basittir. Yurdakul ve ark. [2] çalışmasında çözücü aracının kullanımını ve model göstergelerinin hesaplamalarını göstermişlerdir. Ancak yine de parametre değerlerinin standart hataları ya da güven aralıklarının hesaplanması gereklidir.

Bu çalışmanın amacı Excel'de Monte Carlo benzetimi (simülasyonu) kullanılarak doğrusal olmayan modellerin parametre güven aralıklarının elde edilmesidir. Neden doğrusal olmayan modeller için bunun yapıldığı sorusu akla gelebilir. Bunun iki nedeni vardır: (1) Doğrusal modeller için Excel (veri çözümlene > regresyon) parametrelerin standart hatalarını ve model uyumu göstergelerini hesaplayabilmektedir [1]. (2) Gıda bilimlerinde kullanılan çoğu model (örneğin Arrhenius ve Michaelis-Menten denklemleri) doğrusal değildir. Bu amaç doğrultusunda önce kısaca Monte Carlo benzetiminden kısaca bahsedilecek daha sonra Excel'de bunun nasıl yapılabileceği bir örnek üzerinden açıklayıcı bir şekilde anlatılacaktır. Ancak, Excel'de doğrusal ve doğrusal olmayan regresyon konularında daha detaylı bilgi sahibi olmak isteyen okuyucular yukarıda da sık sık atıfta bulunduğumuz Leylak ve ark. [1] ile Yurdakul ve ark.'nın [2] çalışmalarından faydalanabilirler.

YÖNTEM

Monte Carlo Benzetimi

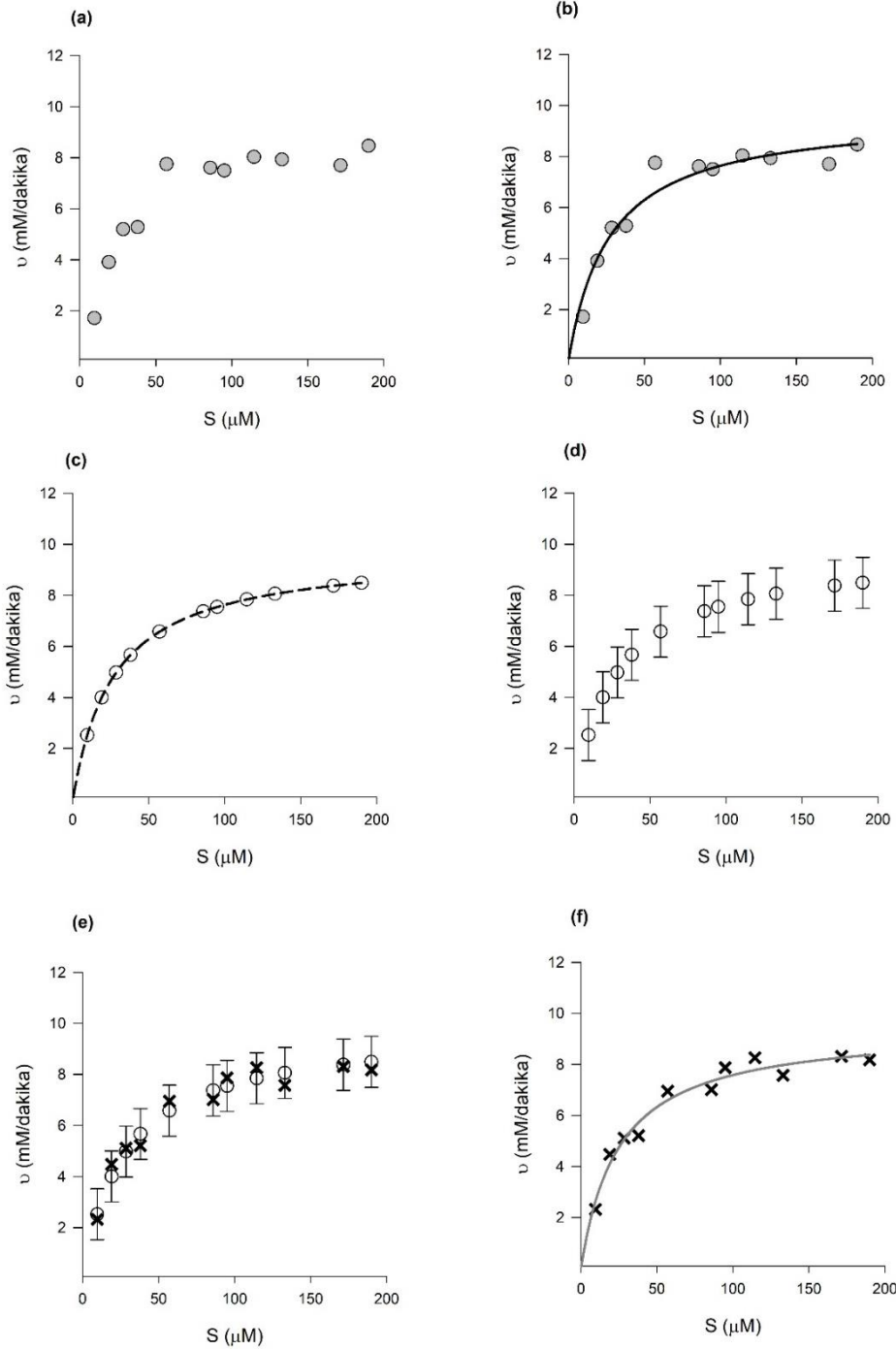
Monte Carlo (MC) yöntemi (deneysel) verileri tanımlayan bir modelin bilgisayar yardımı rastgele benzetimi ilkesine dayanmaktadır. MC model parametrelerinin belirsizliklerini belirleyebilmek için belki de en kolay ve en basit yöntemdir. MC benzetimi yapabilmek için iki bilgiye ihtiyaç vardır. Bunlardan ilki uygun bir model, ikincisi deney verilerindeki belirsizlik ya da standart sapmadır [3].

Uygun bir model bulmak çok da zor değildir. Hatta aynı veri için uygun olan birden çok model olabilir. Dolayısıyla birinci bilgi, modelleme konusunda deneyimli olanlar için, kolaylıkla elde edilebilir. İkinci bilgi ise görecelidir. Yine de bunun için farklı yaklaşımlar vardır. Örneğin mikrobiyolojik veriler için genellikle uygun standart sapma olarak $0.5 \log_{10}$ kullanılır çünkü bakteri sayımlarında $1 \log_{10}$ hata normal olarak sayılır [4, 5] ve $\pm 0.5 \log_{10}$ standart hata olarak kullanılabilir. Öte yandan, veriyi uygulanacak modelin standart hatasını hesaplayarak bunu verilerin standart sapması olarak kullanmak da mümkündür [6]. Böylece MC benzetimi için gerekli olan iki bilgiye de ulaşılabilir.

MC benzetiminin bu çalışma için uygulanışı aşağıda özetlenmiştir:

1. Deneysel veriler uygun bir modelle (parametresine veya parametrelerine göre doğrusal olmayan) Excel'de çözücü aracı kullanılarak tanımlanır.
2. Model parametreleri ve modelin standart hatası hesaplanır.
3. Model parametreleri kullanılarak aynı bağımsız değişken (x) değerlerindeki "mükemmel veri seti" oluşturulur.
4. Modelin standart hatası her bir bağımsız değişken değerinde karşılık gelen mükemmel verinin üzerine standart sapma olarak eklenir.
5. Eklenen standart sapma değerlerinin içerisinde kalacak şekilde sanal veriler Excel kullanılarak üretilir. Sanal veri üretme işlemi Excel'de kolayca yapılabilir. Bununla ilgili detaylı açıklamalar "Bulgular ve Tartışma" kısmında verilmiştir. Yani 100 adet sanal veri seti oluşturulur. MC benzetimi genellikle uygulanacak işleme göre 100, 1000 veya 10000 kez tekrarlanır. Ancak, Lambert ve ark. [6] ve Öksüz ve Buzrul [7] tarafından da ifade edildiği üzere, genellikle 1000 veya 10000 kez tekrar etmenin biyolojik veriler açısından 100 kez tekrardan önemli bir farkı bulunmamaktadır.
6. Yarattıkları her bir sanal veri seti için Excel'de tek bir seferde model (ilk kullandığımız model) uygulanır ve parametre değerleri listelenir.
7. Listelenen parametrelerden değerlerin ortalamaları ve 95% güven aralıkları yine Excel kullanılarak hesaplanır.

Bu işlemin daha iyi anlaşılabilmesi için MC benzetiminin nasıl yapılacağı Şekil 1 üzerinde basitçe gösterilmiştir. Şekil 1a'da gösterilen veri Şekil 1b'de (doğrusal olmayan) Michaelis-Menten denklemi ile tanımlanmıştır. Şekil 1c'de ise model parametreleri kullanılarak mükemmel veri seti oluşturulmuştur. Oluşturulan mükemmel veri setine standart sapma olarak modelin standart hatası (örnek olarak kullanılan veri seti için (Şekil 1a) Michaelis-Menten denklemi kullanılarak (Şekil 1b) modelin standart hatası 0.557 olarak bulunduğundan dolayı her bir veri için $\pm 2 \times 0.557$ standart sapma kullanılmıştır.) eklenmiştir (Şekil 1d). Eklenen standart sapma değerlerinin içerisinde kalmak kaydıyla Excel'de rastgele yeni veriler üretilmiştir (Şekil 1e). Üretilen yeni verilere seçilen model (Michaelis-Menten denklemi) uygulanmıştır (Şekil 1f). Burada Şekil 1e ve 1f'de gösterilen işlemler Excel'de 100 kez tekrarlanmıştır. Ancak, Excel'deki çözücü aracı tek seferde 200 hesaplama yapabilmektedir. Dolayısıyla modeldeki parametre sayısına göre çözücünün hesaplayabileceği miktar kadar giriş yapılması gerekmektedir. Örneğin modelin 2 parametresi varsa tek seferde 100 benzetim yapılabilir ($2 \times 100 = 200$) ama 4 parametrelili model için tek seferde 50 hesaplama yapılacağından ($4 \times 50 = 200$) 100 benzetim için bu işlem iki kez tekrarlanmalıdır.



Şekil 1. Papain'in kazein üzerindeki etkisini gösteren veriler. Veriler van Boekel'dan [3] alınmıştır (a), verilere Michealis-Menten denkleminin uygulanışı (b), uygulanan model yardımıyla mükemmel veri seti oluşturma (c), mükemmel veri setine standart sapma eklenmesi (d), eklenen standart sapma aralığında kalmak koşulu ile rastgele yeni veri oluşturma (e), oluşturulan veri setine Michealis-Menten denkleminin uygulanışı (f)

Figure 1. Data showing the effect of papain on casein. Data were taken from van Boekel [3] (a), the application of the Michealis-Menten equation to the data (b), creating a perfect data set with the help of the applied model (c), adding standard deviation to the perfect data set (d), staying in the added standard deviation range generating new data randomly with (e), applying the Michealis-Menten equation to the generated data set (f)

BULGULAR ve TARTIŞMA

Bu bölümde basit bir örnek üzerinden Excel'de (Bu çalışmada Windows 10'un altında yer alan Excel 2016

kullanılmıştır.) MC benzetimi yapılarak model parametrelerinin güven aralıklarının hesaplanması aşamalı olarak anlatılacaktır.

Zeytindeki Klorofilin Bozulma Kinetiği

Örneğimizde zeytinde bulunan klorofil maddesinin zamana bağlı değişiminin tanımlanmasını inceleyeceğiz. Söz konusu veri daha önce yayımlanmış olan bir çalışmadan alınmış olup [8], Şekil 2'de gösterilmiştir. Bu veriyi tanımlamak için çok basit bir model olan $y = a \cdot e^{-b \cdot t}$ denklemini kullanacağız. Burada y klorofil miktarını (bağımlı değişken), t süreyi ya da zamanı (bağımsız

değişken), e ise Euler sayısını ($e = 2.7182 \dots$) ifade etmektedir. Model parametreleri de a ve b ile gösterilmişlerdir. Excel kullanımına aşina olan birçok kullanıcı bu modelin Excel'in içerisinde yer aldığını bilmektedir. Ancak, daha önce de değinildiği gibi Excel doğrusal olmayan bu modeli doğrusal hale dönüştürerek verilere doğrusal regresyon uygulamaktadır. Bu da sonuçların ya da parametre değerlerinin doğrusal olmayan regresyonla elde edilmesine göre farklı hesaplanmasına yol açmaktadır.

	A	B
1	süre (gün) - t	Klorofil miktarı ($\mu\text{mol/kg}$) - y
2	0	53,76
3	3	40,34
4	4	32,73
5	6	30,64
6	8	25,75
7	10	21,22
8	12	14,1
9	19	11,08
10	26	7,53
11	30	6,87
12	33	5,15
13	40	3,77
14	47	2,87
15	50	2,07
16	60	1,1

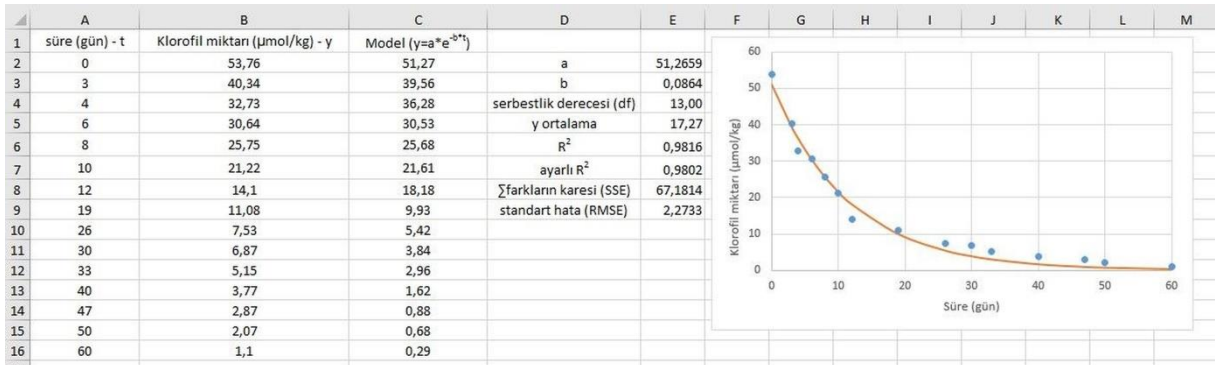
Şekil 2. Yeşil zeytindeki klorofil bozulma verileri. Orijinal veriler Mínguez-Mosquera ve ark.'dan [8] alınmıştır

Figure 2. Chlorophyll degradation data in green olives. Original data were from Mínguez-Mosquera et al. [8]

Model Parametrelerinin ve Model Uyum Göstergelerinin Excel Çözücü Kullanarak Hesaplanması

Şekil 3'te Excel'de deneysel veriler (A ve B kolonu), çözücü aracı kullanılarak elde edilen model parametreleri, model uyumu göstergeleri ve grafik gösterilmiştir. Bu işlemin nasıl yapıldığı Yurdakul ve ark. [2] tarafından detaylıca anlatıldığından sadece sonuçlar

paylaşmıştır. Grafikten görsel olarak model uyumunun iyi olduğu anlaşılrsa da model uyum göstergeleri ($R^2=0.9816$, ayarlı $R^2=0.9802$ ve $RMSE=2.2733$) kullanılan modelin deneysel verileri tanımlamakta oldukça başarılı olduğunu ortaya koymuştur. Şekil 3'te görüldüğü gibi çözücü aracını kullanarak yapılan doğrusal olmayan regresyon sonucu parametre değerleri de elde edilmiştir ($a=51.27$, $b=0.0864$). Ancak parametrelerin güven aralıkları elde edilememiştir. Bunun için MC benzetimi yapılması gereklidir.



Şekil 3. Şekil 2'de gösterilen verilerin Excel'de çözücü aracı kullanılarak üstel model ($y = a \cdot e^{-b \cdot t}$) ile tanımlanması

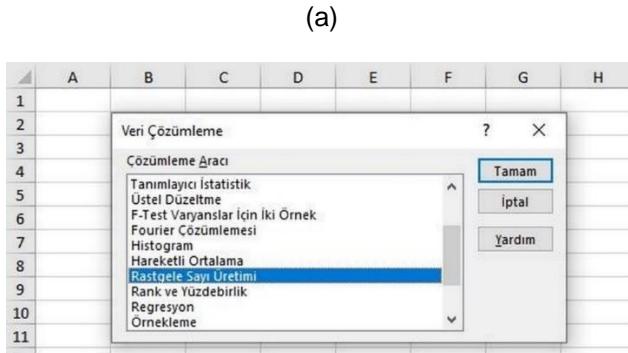
Figure 3. Definition of the data shown in Figure 2 with the exponential model ($y = a \cdot e^{-b \cdot t}$) using the solver tool in Excel

Modelin Standart Hatasının (RMSE değeri) Kullanılarak Excel'de Rastgele Sayılar Üretilmesi

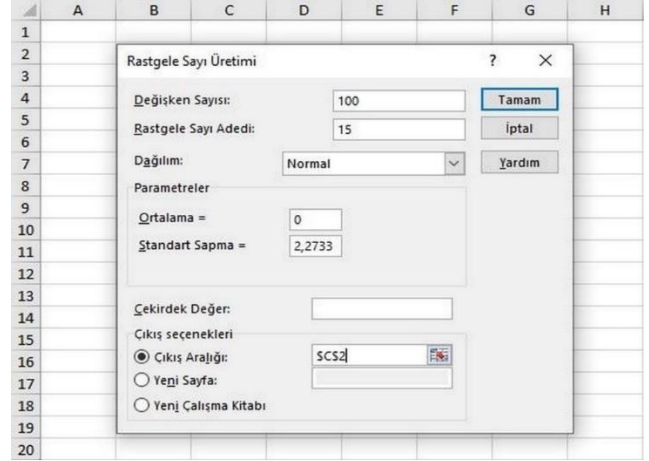
Daha önce ifade ettiğimiz gibi MC benzetimi için modelin RMSE değerini (2.2733) normal dağılımın standart hatası olarak her bir veriye ekleyerek rastgele sayılar üretilmesi gereklidir. Bu amaçla Excel'in içerisindeki veri çözümü aracının içerisinde yer alan "rastgele sayı üretimi" uygulaması kullanılacaktır (Şekil 4a). Excel'de

sırasıyla Veri > Veri Çözümü > Rastgele Sayı Üretimi sekmeleri izlenir. Açılan ekrandan "Dağılım" olarak "Normal" seçilir. Değişken sayısı kaç kez MC benzetimi yapacağımızı gösteren sayıdır ve buraya 100 yazılır. Rastgele sayı adedi ise veri sayımızdır, 15 adet verimiz (Şekil 2) olduğundan bu kısma da 15 yazılır (Şekil 4b). Rastgele sayıların yeni bir Excel sayfasında mı yoksa yeni bir çalışma kitabında mı ya da mevcut çalışma kitabının içerisinde mi yer alacağı aşağıda seçilir. Bütün bu işlemlerin nasıl yapılacağı Şekil 4'te özetlenmiştir.

(b)



(a)



Şekil 4. Excel'de veri çözümü aracının içerisinde yer alan rastgele sayı üretimi uygulaması (a), bu uygulama kullanılarak 15 satır (Şekil 1'de yer alan veri sayısı) 100 sütunluk (Monte Carlo benzetim sayısı) veri üretilmesi ile normal dağılımın seçilerek standart sapma olarak 2.2733 girilmesi (b).

Figure 4. Random number generation application (a) included in the data analysis tool in Excel, using this application to generate 15 rows (the number of data in Figure 1) and 100 columns (Monte Carlo simulation number) by selecting the normal distribution and choosing the standard entering 2.2733 as the deviation (b).

Sanal Veri Setlerinin Oluşturulması

Şekil 5'te de rastgele üretilmiş sayılar gösterilmektedir. Bu sayılar modelimizden elde ettiğimiz verilere yani mükemmel veri setine eklenerek 100 adet sanal veri seti oluşturulacaktır. Bunun için Şekil 5'te yer alan rastgele üretilmiş sayıların altına uygun bir şekilde mükemmel veri seti yapıştırılır (Şekil 6a) ve rastgele sayılar mükemmel veri setine eklenir (Şekil 6b). Mükemmel veri seti yani

B20-B34 sütunu hep sabit olduğundan (sadece eklenecek rastgele sayılar değişmektedir) Excel'in özellikleri kullanılarak \$ işareti (AltGr + 4) yardımıyla (\$ işareti hücre yazısının önüne yazılmalıdır ki sadece sütunun sabit olması sağlanabilsin – Şekil 6b) mükemmel veri seti sabit olacak şekilde bütün rastgele sayılar eklenerek 100 adet sanal veri seti elde edilir (Şekil 6c).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V
1		veri sayısı																				
2		1	0,78844	-1,76076	-1,5477	-0,08863	-1,04607	-2,67563	-0,40074	5,04028	0,45455	-0,96342	6,3985	-2,74248	-1,37325	-0,96304	2,21042	2,36807	-4,0765	3,88264	1,37429	-0,26345
3		2	3,53215	-2,62484	-2,40185	1,63097	-2,33246	2,78877	0,3475	0,61459	0,99854	-1,49959	0,26677	3,16793	-0,59603	1,04047	1,26926	-0,4324	-7,04093	-2,76166	1,91138	0,26257
4		3	1,66649	4,78722	0,06479	3,37503	0,50862	0,31517	-1,37742	-0,16858	1,35991	-1,75724	-3,95171	3,14831	-6,05917	2,88811	-0,84074	-1,55495	-1,7188	0,014	-3,9917	1,97629
5		4	-0,36546	1,65128	-2,13221	1,67378	5,11397	-0,34557	2,98917	-2,78361	4,84966	0,0754	-2,41281	-3,06988	1,54354	1,56155	2,24244	0,65347	1,90445	-0,40852	-1,08041	1,90989
6		5	1,96439	-1,75279	-0,56459	-0,19597	-1,14056	0,60017	4,51674	-0,65564	-2,41037	1,17263	1,11813	2,68783	3,87295	1,9692	-0,37921	-1,14648	-3,93838	-0,43169	-3,44138	0,71936
7		6	0,00687	-0,88766	-3,35423	-1,61549	2,4748	1,24757	-1,8246	0,01748	3,64205	-5,40058	-2,76603	-4,27868	1,70219	-4,96395	-0,05365	-2,64665	0,36124	-2,01516	-2,81442	0,32588
8		7	-4,79842	-1,94502	3,38397	0,87341	-6,25642	-3,20509	4,19858	2,56513	-1,90915	-0,75749	-3,53389	2,56053	2,59193	2,1979	1,49117	-3,98279	-0,84204	-0,38186	1,34642	5,54898
9		8	0,113	0,5422	-4,53059	0,0674	-4,49197	-2,4585	0,41842	-1,76381	-3,12891	0,92702	-2,02057	-3,43701	2,76494	5,74664	0,64513	-0,15882	1,12363	-0,99529	3,98926	0,64459
10		9	0,57554	-5,61639	1,42982	1,92603	-3,74352	2,41678	0,62055	2,57303	3,54383	-0,50862	1,08469	-2,39003	-0,45846	0,64386	-0,01748	-0,14296	-2,93471	1,02774	1,54266	-2,13816
11		10	1,73924	-2,34575	0,47302	-0,13268	-1,8735	-0,82326	0,98325	0,44834	-0,59495	0,36652	1,69552	2,70964	1,71233	0,777	-0,94481	-1,66103	-0,29814	2,28903	2,29799	
12		11	-4,28073	0,2309	-1,9208	0,63771	2,25095	-0,62199	0,79657	2,1433	-3,77766	0,86691	-1,54683	-2,72849	4,21012	-1,29822	0,02217	-0,21256	2,48299	3,47457	-3,13565	-0,22199
13		12	-2,64493	0,61441	0,56047	1,49894	-3,06685	1,56022	-6,15544	-4,45105	0,76429	-0,90514	-0,22828	-1,29945	-6,18306	1,11441	-0,82902	3,14559	2,04574	-3,80563	-2,98216	0,85901
14		13	-4,15254	0,39449	-1,79618	2,60061	0,34416	-0,74408	-1,59563	-0,18847	0,25014	1,75935	4,90883	-2,06169	-6,28768	-1,39061	2,55072	0,58308	-2,62315	4,87364	2,41648	-2,14466
15		14	-1,55847	0,78198	1,78859	3,8177	-0,51254	-2,04027	1,93951	-0,04757	-1,9084	-4,16087	-1,14806	1,29311	1,01581	-2,33129	-0,24384	-0,5329	-2,19318	3,72077	-1,59229	-0,12362
16		15	-2,02134	2,94514	0,33431	-0,81268	0,65292	-0,14156	1,48105	1,42918	1,92827	1,07165	0,98477	1,50803	-2,24046	-2,23849	-1,15617	-1,28351	-3,04326	-5,18402	-4,1881	1,61616
17																						
18																						

Şekil 5. Excel'de rastgele üretilen verilerin (Şekil 4c) bir kısmı. Değerlerin okunabilmesi 100 benzetimin sadece 20 tanesi gösterilmiştir

Figure 5. Some of the randomly generated data in Excel (Figure 4c). Only 20 of the 100 simulations are shown so that the values can be read

Çözücü Kullanarak Aynı Anda Birden Fazla Veri Setine Modelin Uydurulması

Sanal veri setinin hemen altına uygun bir şekilde modelimiz ve onun hemen altına da model ya da

regresyon parametreleri yerleştirilir (Şekil 7a) her bir set için model parametreleri için ilk elde ettiğimiz değerler yazılabilir ($a=51,27$, $b=0,0864$). Model yazılırken dikkat edilmesi gereken husus \$ işaretinin (AltGr + 4) nasıl kullanılacağıdır. Örneğin C37 hücresine " $=C$53*ÜS(-$

S. Buzrul Akademik Gıda 19(3) (2021) 291-299

C\$54*\$A37” yazılmalıdır çünkü A sütunu (A37-A51) süreyi göstermektedir ve her bir model için aynı süreler kullanılacaktır. Sütunun sabit olması için \$ işareti başa yazılır. Öte yandan, parametre değerleri aynı veri seti için aynı olmalıdır bu yüzden sütun harfi ile satır numarası arasında \$ işareti konularak bu işlem yapılır. Excel kullanımına ve formül yazımına aşına oldukça bu basit kurallar yerine oturacaktır.

Parametrelerin hemen altına da farkların kareleri toplamı (SSE) yazılır. Yüz adet sanal veri seti ile (yine 100 adet) model farklarının kareleri toplamı hesaplatılmalıdır.

Bunun için C55 hücresine =TOPLA((C20:C34-C37:C51)^2) yazılır ancak bu formül dizisi olduğundan (yani her bir çıkarma işlemi yapıldıktan sonra kare alma işlemi yapıldığından) formül seçilerek Ctrl + Shift + Enter'a basılır ve formül {=TOPLA((C20:C34-C37:C51)^2)} haline getirilir. Elde edilen tüm SSE'ler toplanarak B57 hücresine yazılır. Çözücü 200 değeri (100 satıra yazılmış 2 adet model parametresi) kullanarak B57 hücresindeki sayıyı en düşük yapacak şekilde ayarlanır ve çalıştırılır. Sonuçta 100 adet a ve b değeri elde edilir (Şekil 7b).

(a)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	
15			14	-1,55847	0,78198	1,78859	3,8177	-0,51254	-2,04027	1,93951	-0,04757	-1,9084	-4,16087	-1,14806	1,29311	1,01581	-2,33129	-0,24384	-0,5329	-2,19318	3,72077	-1,59229
16			15	-2,02134	2,94514	0,33431	-0,81268	0,65292	-0,14156	1,48105	1,42918	1,92827	1,07165	0,98477	1,50803	-2,24046	-2,23849	-1,15617	-1,28351	-3,04326	-5,18402	-4,1881
17																						
18																						
19				süre (gün) - t Model (y=a*e ^{-bt})																		
20			0	51,27																		
21			3	39,56																		
22			4	36,28																		
23			6	30,53																		
24			8	25,68																		
25			10	21,61																		
26			12	18,18																		
27			19	9,93																		
28			26	5,42																		
29			30	3,84																		
30			33	2,96																		
31			40	1,62																		
32			47	0,88																		
33			50	0,68																		
34			60	0,29																		
35																						

(b)

	A	B	C	D
17				
18				
19			süre (gün) - t Model (y=a*e ^{-bt})	
20	0	51,27	=B20+C2	=B20+D2
21	3	39,56	=B21+C3	=B21+D3
22	4	36,28	=B22+C4	=B22+D4
23	6	30,53	=B23+C5	=B23+D5
24	8	25,68	=B24+C6	=B24+D6
25	10	21,61	=B25+C7	=B25+D7
26	12	18,18	=B26+C8	=B26+D8
27	19	9,93	=B27+C9	=B27+D9
28	26	5,42	=B28+C10	=B28+D10
29	30	3,84	=B29+C11	=B29+D11
30	33	2,96	=B30+C12	=B30+D12
31	40	1,62	=B31+C13	=B31+D13
32	47	0,88	=B32+C14	=B32+D14
33	50	0,68	=B33+C15	=B33+D15
34	60	0,29	=B34+C16	=B34+D16
35				

(c)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U		
15			14	-1,55847	0,78198	1,78859	3,8177	-0,51254	-2,04027	1,93951	-0,04757	-1,9084	-4,16087	-1,14806	1,29311	1,01581	-2,33129	-0,24384	-0,5329	-2,19318	3,72077	-1,59229	
16			15	-2,02134	2,94514	0,33431	-0,81268	0,65292	-0,14156	1,48105	1,42918	1,92827	1,07165	0,98477	1,50803	-2,24046	-2,23849	-1,15617	-1,28351	-3,04326	-5,18402	-4,1881	
17																							
18																							
19				süre (gün) - t Model (y=a*e ^{-bt})																			
20			0	51,27	52,05	49,51	49,72	51,18	50,22	48,59	50,87	56,31	51,72	50,30	57,66	48,52	49,89	50,30	53,48	53,63	47,19	55,15	52,64
21			3	39,56	45,09	36,93	37,16	41,19	37,23	42,35	39,91	40,17	40,56	38,06	39,83	42,73	38,96	40,60	40,83	39,13	32,52	36,80	41,47
22			4	36,28	37,95	41,07	36,35	39,66	36,79	36,60	34,91	36,12	37,64	34,53	32,33	39,43	30,23	39,17	35,44	34,73	34,57	36,30	32,29
23			6	30,53	30,16	32,18	28,39	32,20	35,64	30,18	33,52	27,74	35,38	30,60	28,11	27,46	32,07	32,09	32,77	31,18	32,43	30,12	29,45
24			8	25,68	27,65	23,93	25,12	25,49	24,54	26,28	30,20	25,03	23,27	26,85	26,80	28,37	29,55	27,65	25,30	24,53	21,74	25,25	22,24
25			10	21,61	21,61	20,72	18,25	19,99	24,08	22,85	19,78	21,62	25,25	16,20	18,84	17,33	23,31	16,64	21,55	18,96	21,97	19,59	18,79
26			12	18,18	13,38	16,23	21,56	19,05	11,92	14,97	22,38	20,74	16,27	17,42	14,64	20,74	20,77	20,37	19,67	14,19	17,33	17,79	19,52
27			19	9,93	10,04	10,47	5,40	9,99	5,44	7,47	10,35	8,16	6,80	10,85	7,91	6,49	12,69	15,67	10,57	9,77	11,05	8,93	13,92
28			26	5,42	6,00	-0,19	6,85	7,35	1,68	7,84	6,04	7,99	8,97	4,91	6,51	3,03	4,96	6,07	5,40	5,28	2,49	6,45	6,96
29			30	3,84	5,58	1,49	4,31	3,70	1,96	3,01	4,82	4,29	3,24	4,42	4,20	5,53	6,55	5,55	4,61	2,89	2,18	3,54	6,13
30			33	2,96	-1,32	3,19	1,04	3,60	5,21	2,34	3,76	5,10	-0,42	3,85	1,41	0,23	7,17	1,66	2,98	2,75	5,44	6,44	-0,17
31			40	1,62	-1,03	2,23	2,18	3,12	-1,45	3,18	-4,54	-2,83	2,38	0,71	1,39	0,32	-4,57	2,73	0,79	4,76	3,66	-2,19	-1,36
32			47	0,88	-3,27	1,22	-0,91	3,48	1,23	0,14	-0,71	0,69	1,13	2,64	5,79	-1,18	-5,40	-0,51	3,43	1,47	-1,74	5,76	3,30
33			50	0,68	-0,88	1,46	2,47	4,50	0,17	-1,36	2,62	0,63	-1,23	-3,48	-0,47	1,97	1,70	-1,65	0,44	0,15	-1,51	4,40	-0,91
34			60	0,29	-1,73	3,23	0,62	-0,53	0,94	0,15	1,77	1,72	2,22	1,36	1,27	1,80	-1,95	-1,95	-0,87	-1,00	-2,76	-4,90	-3,90
35																							

Şekil 6. Şekil 5'te gösterilen rastgele üretilmiş sayıların hemen altına mükemmel veri setinin girilmesi (a), rastgele üretilmiş verilere mükemmel veri setinin eklenmesi (b), bu işlemin sonucunda elde edilen verilerin bir kısmı (c). Negatif değerler, mükemmel veri setinden çıkarılan sapma değerinin verinin kendisinden daha büyük olduğu anlamına gelmektedir

Figure 6. Entering the perfect data set just below the randomly generated numbers shown in Figure 5 (a), adding the perfect data set to the randomly generated data (b), some of the data obtained as a result of this process (c). Negative values mean that the deviation value extracted from the perfect dataset is greater than the data itself

(a)

	A	B	C
36	süre (gün) - t	Model ($y=a \cdot e^{-bt}$)	
37	0	=51,2659*ÜS(-0,0864*A37)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA37)
38	3	=51,2659*ÜS(-0,0864*A38)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA38)
39	4	=51,2659*ÜS(-0,0864*A39)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA39)
40	6	=51,2659*ÜS(-0,0864*A40)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA40)
41	8	=51,2659*ÜS(-0,0864*A41)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA41)
42	10	=51,2659*ÜS(-0,0864*A42)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA42)
43	12	=51,2659*ÜS(-0,0864*A43)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA43)
44	19	=51,2659*ÜS(-0,0864*A44)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA44)
45	26	=51,2659*ÜS(-0,0864*A45)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA45)
46	30	=51,2659*ÜS(-0,0864*A46)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA46)
47	33	=51,2659*ÜS(-0,0864*A47)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA47)
48	40	=51,2659*ÜS(-0,0864*A48)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA48)
49	47	=51,2659*ÜS(-0,0864*A49)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA49)
50	50	=51,2659*ÜS(-0,0864*A50)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA50)
51	60	=51,2659*ÜS(-0,0864*A51)	=C\$53*ÜS(-C\$54*SA51)
52			
53	a	51,2659	51,2629
54	b	0,0864	0,0864
55	SSE	67,1814	=TOPLA((C20:C34-C37:C51)^2)

(b)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U
35																					
36	süre (gün) - t	Model ($y=a \cdot e^{-bt}$)																			
37	0	51,27	54,1278	51,5098	49,7228	52,0094	52,1377	50,946	51,2244	54,0309	53,0203	50,0028	55,2564	51,8775	48,8574	51,1874	52,7441	52,8715	46,6929	52,6950	51,1128
38	3	39,56	40,7832	39,2434	38,1494	40,5327	39,2472	39,2856	40,2277	40,9044	40,708	38,356	40,3005	39,5993	38,8464	40,211	40,6828	39,5171	36,4324	39,9135	39,1151
39	4	36,29	37,1109	35,842	34,9246	37,3003	35,7021	36,0253	37,1143	37,2803	37,2757	35,1112	36,276	36,1901	35,988	37,1027	37,3099	35,8624	33,5403	36,3834	35,7779
40	6	30,53	30,7285	29,898	29,2698	31,5885	29,5437	30,294	31,5918	30,967	31,2549	29,422	29,3926	30,2271	30,8867	31,5883	31,3797	29,5358	28,4266	30,2322	29,9336
41	8	25,68	25,4438	24,998	24,5306	26,7512	24,4476	25,4745	26,891	25,7228	26,2065	24,6546	23,8153	25,2465	26,5086	26,8935	26,392	24,3253	24,0925	25,121	25,0439
42	10	21,61	21,068	20,8039	20,5587	22,6548	20,2305	21,4217	22,8897	21,3667	21,9736	20,6597	19,2964	21,0866	22,751	22,8965	22,1972	20,034	20,4193	20,8739	20,9529
43	12	18,18	17,4447	17,3538	17,2299	19,1856	16,7409	18,0137	19,4837	17,7483	18,4244	17,3121	15,6349	17,6122	19,526	19,4935	18,6691	16,4997	17,3061	17,3448	17,5302
44	19	9,93	9,01165	9,19969	9,28521	10,7233	8,62933	9,82258	11,0863	9,27091	9,94522	9,32479	7,48615	9,37848	11,4357	11,0998	10,1861	8,36488	9,69953	9,07098	9,39047
45	26	5,42	4,65528	4,87698	5,0038	5,99354	4,44811	5,35608	6,30812	4,84271	5,36829	5,02261	3,58446	4,99404	6,6975	6,32033	5,55771	4,24075	5,4363	4,74393	5,03023
46	30	3,84	3,19173	3,39354	3,5146	4,29848	3,04591	3,78743	4,57051	3,34138	3,77415	3,5268	2,35321	3,48388	4,93333	4,58123	3,93138	2,87648	3,90498	3,27546	3,52106
47	33	2,96	2,40485	2,58541	2,69655	3,34995	2,29284	2,92058	3,58933	2,52962	2,89772	2,70532	1,71628	2,65933	3,92249	3,59885	3,03237	2,14993	3,04688	2,48098	2,69456
48	40	1,62	1,24231	1,37059	1,45317	1,87237	1,18188	1,59254	2,04234	1,32136	1,56415	1,45717	0,82177	1,41609	2,29726	2,04922	1,65451	1,08995	1,70769	1,2975	1,44341
49	47	0,88	0,64176	0,72658	0,78311	1,04652	0,60922	0,86838	1,1621	0,69022	0,84431	0,78487	0,39348	0,75407	1,34543	1,16685	0,90273	0,55257	0,95711	0,67856	0,77319
50	50	0,68	0,48354	0,55356	0,60084	0,81559	0,45859	0,66963	0,91262	0,52254	0,64824	0,60206	0,28698	0,5756	1,06975	0,91663	0,69629	0,413	0,74679	0,51397	0,5917
51	60	0,29	0,18821	0,23257	0,24843	0,35526	0,17794	0,28157	0,40781	0,20664	0,26866	0,24875	0,10022	0,23396	0,49814	0,41002	0,29903	0,15649	0,32658	0,2036	0,24256
52																					
53	a	51,2659	54,1278	51,5098	49,7228	52,0094	52,1377	50,9460	51,2244	54,0309	53,0203	50,0028	55,2564	51,8775	48,8574	51,1874	52,7441	52,8715	46,6929	52,6950	51,1128
54	b	0,0864	0,0944	0,0907	0,0883	0,0831	0,0947	0,0866	0,0806	0,0928	0,0881	0,0884	0,1053	0,0900	0,0764	0,0805	0,0865	0,0970	0,0827	0,0926	0,0892
55	SSE	67,1814	80,7513	86,3682	57,1501	40,3993	119,7228	47,0426	90,0611	65,2175	84,9870	52,9572	76,9450	104,4963	163,6315	87,0445	17,7859	30,3654	85,5231	115,3266	109,7128
56																					
57	Toplam SSE		7103,7146																		

Şekil 7. Şekil 6b'de gösterilen verilerin hemen altına model parametre değerlerinin girilerek modelin hesaplanması ve sanal veri seti ile model arasındaki farkların karelerinin toplamının (SSE) alınması (a), B57 hücresinde 100 adet SSE değerinin toplanması ve çözücü aracında bu değer en küçük yapılarak elde edilen 100 adet parametre değerinin bir kısmının gösterilmesi (b). Değerlerin okunabilmesi 100 işlemden sadece 19 tanesi gösterilmiştir

Figure 7. Calculating the model by entering the model parameter values just below the data shown in Figure 6b and taking the sum of the squares (SSE) of the differences between the virtual data set and the model (a), adding 100 SSE values in cell B57 and minimizing this value in the solver tool. Displaying part of the 100 parameter values obtained (b). Only 19 out of 100 operations were shown to be able to read the values

Parametrelerin %95 güven aralıklarının hesaplanması ve sonuçların Excel dışında doğrusal olmayan regresyon yapan başka bir programla karşılaştırılması

Elde edilen 100'er adet parametre değerleri Excel'de alt alta sıralandıktan sonra %95 güven aralıkları "=YÜZDEBİRLİK(dizi; 0.025)" ve "YÜZDEBİRLİK(dizi; 0.975)" kullanılarak bulunabilir. Örneğimizde a parametresinin %95 güven aralığı 48.5477 ile 54.7477

arasında değişmektedir. Diğer parametrenin %95 güven aralığı ise 0.0765 ile 0.0964 arasında değişmektedir. Peki bu ne anlama gelmektedir? Doğrusal olmayan regresyon sonucu elde edilen parametre değerleri %95 ihtimalle bu değerler arasındadır. Dikkat edilirse güven aralıkları simetrik değildir çünkü (a parametresinin değeri 51.2659 olarak bulunurken b parametresi 0.0864 olarak hesaplanmıştır (Şekil 2)) doğrusal olmayan regresyonda doğrusal regresyonun aksine güven aralıkları simetrik olmaz [9]. Ancak, genelde doğrusal yaklaşımla güven aralıkları simetrikmiş gibi gösterilir ya da hesaplanır.

Tablo 1. Üstel model ($y = a \cdot e^{-bt}$) parametrelerinin standart hatalarının, alt ve üst limitlerinin Excel'de 100 Monte Carlo benzetimi yapılarak hesaplanmasının SigmaPlot programının çıktıları ile karşılaştırılması
Table 1. Comparison of the standard errors, lower and upper limits of the exponential model ($y = a \cdot e^{-bt}$) parameters with the output of SigmaPlot program by simulating 100 Monte Carlo in Excel

Program	Parametre	Parametre değeri	Standart hata	Alt limit (%95)	Üst limit (%95)	R ²	Ayarlı R ²	RMSE
Excel	a	51.2629	1.6744	48.5477	54.7477	0.9816	0.9802	2.2733
	b	0.0864	0.0059	0.0077	0.0096			
SigmaPlot	a	51.2629	1.7754	47.4304	55.1014	0.9816	0.9802	2.2733
	b	0.0864	0.0058	0.0074	0.0099			

* Alt ve üst limitler (%95) doğrusal yaklaşım yapılarak hesaplanmıştır.

Sonuçları karşılaştırmak için SigmaPlot programı yardımıyla aynı veri seti aynı modelle tanımlanmıştır. Bu sonuçlar Tablo 1’de verilmiştir. Görüldüğü gibi parametre değerleri ve model uyum göstergeleri Excel çözücü ile birebir aynıdır ve bu beklenen bir sonuçtur [2]. SigmaPlot programı model parametrelerinin yanında bu parametrelerin standart hatalarını da vermiştir. Bu hatalar kullanılarak doğrusal varsayım ile simetrik %95 güven aralıkları hesaplanabilir. Standart hataların $t_{0.05}$ değeri ile çarpılması ile %95 güven aralıkları hesaplanabilir. Bunun için t tablosunda bakılabilir ya da Excel’de t tablosuna bakmadan $t_{0.05}$ değeri hesaplanabilir. Excel’de herhangi bir hücreye “=T.TERS.2K(0.05; serbestlik derecesi)” yazılabilir. Serbestlik derecesi (veri sayısı – parametre sayısı) olduğundan yani örneğimiz için $15 - 2 = 13$ olduğundan $t_{0.05}$ değeri 2.1604 olarak bulunabilir. Bu değer her bir parametrenin standart hatası ile çarpıldığında %95 güven aralığı a için $\pm 3.8355 b$ için ise ± 0.01253 olarak hesaplanır. Bunlar a ve b ’nin regresyonda elde ettiğimiz değerlerine eklenirse simetrik aralıklar a için 47.4304-55.1014 b için 0.07387-0.09893 bulunur. Sonuç olarak her iki yöntemle de birbirine yakın güven aralıkları elde edilmiştir. Ancak, doğrusal olmayan regresyonda güven aralıkları simetrik olamayacağından ikinci örnekte ve genelde yapıldığı gibi doğrusal yaklaşım bu aralıkların yanlış hesaplanmasına yol açacaktır [10].

SONUÇ ve BAZI ÖNERİLER

Doğrusal olmayan modellerin kullanımı gıda bilimleri de dahil olmak üzere birçok alanda oldukça yaygındır. Bir takım ücretli yazılımlar kullanılarak doğrusal olmayan regresyon yapılabilir, böylece model parametreleri ve bu parametrelerin belirsizlikleri bulunabilir. Ancak, bu ücretli yazılımları kullanabilmek için belirli bilgi ve beceriler gereklidir. Öte yandan, her ne kadar Excel de ücretli olsa da kullanılan hemen her bilgisayarda bu hesap çizelgesi yazılımı yüklüdür. Dahası verilerle uğraşan araştırmacılar Excel kullanımına oldukça aşinadır.

Excel kullanılarak doğrusal regresyon yapmak nispeten kolaydır. Bunun için Excel’deki veri çözümleme aracının içerisinde yer alan regresyon uygulaması kullanılabilir ve model parametreleriyle birlikte bu parametrelerin standart hataları ve %95 güven aralıkları da elde edilebilir. Dahası model uyumu gösteren R^2 , ayarlı R^2 ve RMSE değerleri de bulunabilir. Excel’de doğrusal olmayan regresyon yapılmak isteniyorsa çözücü aracı kullanılmalıdır. Ancak, böyle bir durumda model parametrelerinin standart hata ya da güven aralıkları elde edilemez. Sadece parametre değerleri bulunabilir ve eğer istenirse R^2 , ayarlı R^2 ve RMSE değerleri de hesaplanabilir.

Bu çalışmada Excel’de doğrusal olmayan regresyon yapıldığında model parametrelerinin %95 güven aralıklarının nasıl elde edileceği gösterilmiştir. Bunun için Excel’de MC benzetimi yapılmıştır. MC benzetimi sırasında Excel’de yer alan veri çözümleme aracı içerisindeki rastgele sayı üretimi uygulaması

kullanılmıştır. Çözücü aracıyla da 2 parametrelili bir modelin 100 farklı veri setine aynı anda uygulanması ve parametrelerin güven aralıklarının hesaplanması gösterilmiştir. Unutulmamalıdır ki çözücü aracı tek seferde 200 hesaplama yapabilmektedir dolayısıyla 3, 4 veya daha fazla parametrelili modeller için bu çalışmada gösterilen yöntem birden fazla tekrarlanmalıdır. Örneğin 4 parametrelili bir model için iki sefer 50 benzetim yapılabilir.

Excel genellikle grafik çizmek, bazı basit istatistiksel (örneğin standart sapma hesaplaması) ve matematiksel işlemleri (örneğin logaritmik işlemler) yapmak için kullanılsa da araştırmacıların Excel kullanımı geliştikçe veri çözümleme ve çözücü araçlarına aşinalığı da artmaktadır. Bu da MC benzetimi gibi biraz daha ileri yöntemlerin kullanımlarını kolaylaştıracaktır. Bu çalışma gıda bilimleri alanında ücretli yazılıma sahip olmayan ve verilerle uğraşan birçok araştırmacı için faydalı olacaktır.

KAYNAKLAR

- [1] Leylak, C., Yurdakul, M., Buzrul, S. (2020). Gıda bilimlerinde Excel kullanımı 1: Doğrusal regresyon. *Food and Health*, 6(3), 186-198.
- [2] Yurdakul, M., Leylak, C., Buzrul, S. (2020). Gıda bilimlerinde Excel kullanımı 2: Doğrusal olmayan regresyon. *Food and Health*, 6(3), 199-212.
- [3] van Boekel, M.A.J.S. (2009). *Kinetic modeling of reactions in foods*. CRC press Boca Raton FL.
- [4] Jarvis, B. (1989). Statistical aspects of the microbiological analysis of foods. In: *Progress in Industrial Microbiology*, Vol. 21. Elsevier, Amsterdam.
- [5] Mossel, D.A.A., Corry, J.E.L., Struijck, C.B., Baird, R.M. (1995). *Essentials of the Microbiology of Foods*. John Wiley & Sons, Chichester.
- [6] Lambert, R.J.W., Mytilinaios, I., Maitland, L., Brown, A.M. (2012). Monte Carlo simulation of parameter confidence intervals for non-linear regression analysis of biological data using Microsoft Excel. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 107, 155-163.
- [7] Öksüz, H.B., Buzrul, S. (2020). Monte Carlo analysis for microbial growth curves. *Journal of Microbiology, Biotechnology and Food Science*, 10(3), 418-423.
- [8] Minguez-Mosquera, M.I., Gandul-Rojas, B., Minguez-Mosquera, J. (1994). Mechanism and kinetics of the degradation of chlorophylls during the processing of green table olives. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 42, 1089-1095.
- [9] Brown, A.M. (2001). A step-by-step guide to non-linear regression analysis of experimental data using a Microsoft Excel spreadsheet. *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, 65, 191-200.
- [10] van Boekel, M.A.J.S. (1996). Statistical aspects of kinetic modeling for food science problems. *Journal of Food Science*, 61(3), 477-485, 489.