LABORATORIUM KIMIA FISIKA
Jurusan Kimia - FMIPA
Universitas Gadjah Mada (UGM)

KINETIKA KIMIA - Suplemen
Analisis Regresi Linear

Drs. Iqmal Tahir, M.Si.

Laboratorium Kimia Fisika,, Jurusan Kimia
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, 55281

Tel : 087 838 565 047; Fax : 0274-545188
Email :
iqmal@ugm.ac.id atau iqmal.tahir@yahoo.com

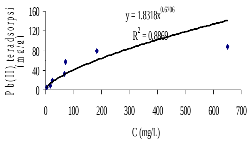
Website :
http://iqmal.staff.ugm.ac.id
http://iqmaltahir.wordpress.com

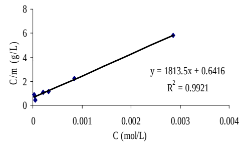
Model hubungan variabel

Dalam pengukuran dan pengamatan sistem kimia sering dijumpai hubungan antar variabel :

$y = f(x)$

$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$





Analisis hubungan antar variabel dengan teknik regresi.

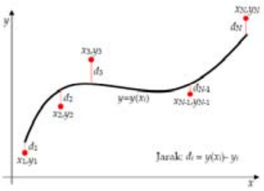
TIPE MODEL HUBUNGAN

- Linear, melewati intersep = 0
  Y = bX
- Linear, melewati intersep ≠ 0
  Y = a + bX

Dengan :
b = slope garis
a = intersep pada sumbu Y

Kurva regresi

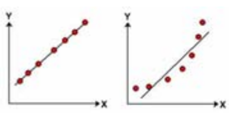
Disajikan 1 set data (x_i, y_i) untuk I = 1.2,3… N
N adalah jumlah data atau jumplah pengukuran
Akan terdapat kurva y = f(x) yang menghubungkan data antar variabel tersebut dan menggambarkan korelasi teoritis antara x dan y.



Definisi: *Dari semua kurva pendekatan terhadap satu set data, kurva yang mempunyai sifat bahwa nilai $d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_N^2$ adalah minimum, disebut dengan kurva terbaik yang mewakili data.*

Model pola hubungan

Model hubungan :
- Linearistik
- Kuadratik
- Parabola
- Polinomial berderajat tinggi
- Kurva model lainnya.



Dalam kinetika dicari hubungan yang linearistik dan kemudian menentukan parameter regresinya.

Regresi garis lurus (linear)

Konsep matematik

Untuk mengenalkan konsep analisis regresi kuadrat terkecil akan diawali dengan analisis regresi garis lurus. Pada kasus ini diandaikan terdapat satu set data pengukuran (x_1,y_1), (x_2,y_2), …, (x_N,y_N) yang akan diwakili dengan garis lurus

$$y = a + bx$$

Y = variabel dependen yang diprediksikan
a = konstanta
b = koefisien regresi X terhadap Y
X = variabel independen yang mempunyai nilai tertentu

dengan a dan b adalah konstanta yang akan dihitung dengan metode kuadrat terkecil.

Pertama kali adalah dihitung jarak vertikal setiap datum dengan garis lurus diatas

$$d_i = a + bx_i - y_i \qquad (1.2)$$

Regresi garis lurus (linear)

Dalam Pers.(1.2) harus diingat bahwa (x_i, y_i) telah diketahui dari data pengukuran. Jika disyaratkan agar $\Delta = d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_N^2$ harus minimum, maka syarat itu mempunyai makna bahwa

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a}\left(d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_N^2\right) = 0$$
$$= 2\left(d_1 + d_2 + \ldots + d_N\right) = 0$$
$$= 2\sum_{i=1}^{N}\left(a + bx_i - y_i\right) = 0$$

atau $$aN + b\sum_{i=1}^{N} x_i = \sum_{i=1}^{N} y_i \qquad (1.3a)$$

$$\frac{\partial \Delta}{\partial b} = \frac{\partial}{\partial b}\left(d_1^2 + d_2^2 + \ldots + d_N^2\right) = 0$$
$$= 2\left(d_1 x_1 + d_2 x_2 + \ldots + d_N x_N\right) = 0$$
$$= 2\sum_{i=1}^{N}\left(ax_i + bx_i^2 - x_i y_i\right) = 0$$

atau $$a\sum_{i=1}^{N} x_i + b\sum_{i=1}^{N} x_i^2 = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \qquad (1.3b)$$

Regresi garis lurus (linear)

Dalam bentuk matrik Pers.(1.3a) dan (1.3b) dapat ditulis sebagai berikut

$$\begin{bmatrix} N & \sum_{i=1}^{N} x_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_i & \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a \\ b \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum_{i=1}^{N} y_i \\ \sum_{i=1}^{N} x_i y_i \end{Bmatrix} \qquad (1.3c)$$

Dari Pers.(1.3c) dapat dihitung nilai konstanta a dan b, yang dapat dinyatakan sebagai

$$a = \frac{\left(\sum_{i=1}^{N} y_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} x_i y_i\right)}{N\left(\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2}$$
$$b = \frac{N\left(\sum_{i=1}^{N} x_i y_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} y_i\right)}{N\left(\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2} \qquad (1.4)$$

Penyelesaian regresi garis lurus (linear)

Contoh untuk data kurva standar :
(asumsi a = 0, melewati titik koordinat asal)

ppm	abs	xy	x^2
1	0.020	0.020	1
2	0.038	0.076	4
3	0.064	0.192	9
4	0.077	0.308	16
5	0.105	0.525	25
	sums	1.121	55

$$b_1 = \frac{\Sigma x_1 y_1}{\Sigma x^2_i} = 0.0204 \quad \text{so} \quad Y = 0.0204\,X$$

Penyelesaian regresi garis lurus (linear)

Berikut ini adalah contoh perhitungan regresi linier sederhana hasil pengamatan densitas pakan (X) terhadap tingkat kecernaan bahan kering (Y):

Sample	X_i	Y_i	$X_i Y_i$	X_i^2	Y_i^2
1	13,9427	54,73	763,0840	194,3989	2995,3729
2	9,9157	53,87	534,1588	98,3211	2901,9769
3	7,5652	52,52	397,3243	57,2323	2758,3504
4	14,6474	56,06	821,1332	214,5463	3142,7236
5	9,9510	54,55	542,8270	99,0224	2975,7025
6	6,8356	53,21	363,7223	46,7254	2831,3041
7	13,6373	57,43	783,1901	185,9759	3298,2049
8	10,2808	55,82	573,8743	105,6948	3115,8724
9	7,3421	53,86	395,4455	53,9064	2900,8996
Jumlah	94,1178	492,05	5174,7595	1055,8236	26920,4073
Rata-rata	10,4575	54,6722	574,9733	117,3137	2991,1564

Perhitungan:

a = [(492,05)(1055,8236) - (94,1178)(5174,7595)] / [(9)(1055,8236) - $(94,1178)^2$]
a = 50,4166337304825
a = 50,4166

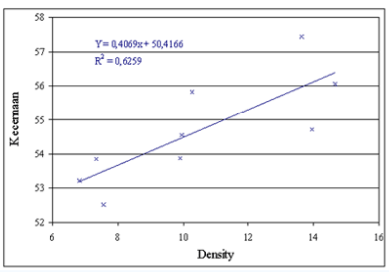
b = [(9)(5174,7595) - (94,1178)(492,05)] / [(9)(1055,8236) - $(94,1178)^2$]
b = 0,406939988245132
b = 0,4069

Sehingga diperoleh perasamaan regresi linier sederhana:

Y = 50,4166 + 0,4069X

Penyelesaian regresi garis lurus (linear)

Penyajian data dengan grafis :
Dibantu dengan program komputer : MS Excel, program statistik



Koefisien Korelasi

Digunakan untuk menyatakan kuantitas tingkat hubungan sudah baik atau belum (goodness) ?

Untuk kurva regresi garis lurus dengan persamaan $y = a + bx$, maka koefisien korelasinya dapat ditulis sebagai

$$r = \frac{N\sum_{i=1}^{N}(x_i y_i) - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)\left(\sum_{i=1}^{N} y_i\right)}{\sqrt{\left[N\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right)^2\right]\left[N\sum_{i=1}^{N} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{N} y_i\right)^2\right]}} \qquad (1.16)$$

Ukuran korelasi

R → memiliki arah

Values range between -1 to +1 where

- **-1** indicates perfect correlation with a negative slope.
- **+1** indicates perfect correlation with a positive slope.
- **0** no correlation - this is rare, even a 'bad' fit will have at least some correlation.

Koefisien determinasi

R^2 → lebih sensitif , tidak memiliki arah

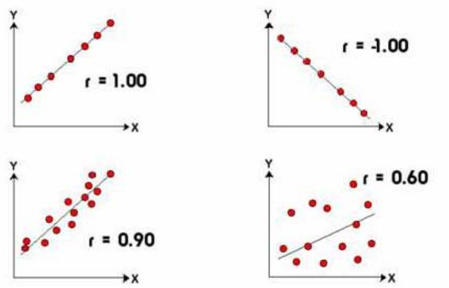
Relationship between the correlation coefficient (r) and proportion of variance (r^2)

Correlation, r	Proportion of variance, r^2
0.10	0.01
0.20	0.04
0.30	0.09
0.40	0.16
0.50	0.25
0.60	0.36
0.70	0.49
0.80	0.64
0.90	0.81
1.00	1.00

r values much below 0.9 indicate a 'poor' relationship

Koefisien korelasi

Nilai r harus selalu dicek dengan korelasi secara nyata.



Contoh soal :

Data grafik

Konsentrasi	Ulangan	
	I	II
1	3,500	3,398
2	6,055	---
3	8,691	8,721
4	11,249	11,389
5	13,978	---
6	16,431	16,527

- Buatlah kurva regresi dan tentukan persamaan garis regresi linear untuk data I !
- Ulangi langkah a apabila data II dimasukkan !
- Ulangi langkah a dan b jika intersep dipaksakan melewati titik 0 (tanpa intersep) !
- Hitung nilai r dan r^2 !