

1. Allgemeine Hinweise

Man sollte eine Excel-Tabelle immer so übersichtlich wie möglich halten. Dazu empfiehlt es sich, alle benötigten Daten, Konstanten und Messwerte inklusive aller dazugehörigen Einheiten anzugeben. Dies erleichtert das eventuelle Umformen von Werten.

Formatierung von Zellinhalten

Excel unterscheidet zwischen „Zahlenwerten“, „Text“ (der auch Ziffern oder Zahlen enthalten kann!), *Fehlerwerten* und *Gleichungen* („Formeln“). Sie erkennen das daran, dass Excel *Zahlenwerte* als Standard *rechtsbündig* in der Zelle ausrichtet, während „Text“ als Standard *linksbündig* ausgerichtet ist. *Fehlerwerte* wie „#NV“ (not a value, kein gültiger Wert), „#DIV/0!“ (Division durch Null), „#WERT!“ (eine Rechnung verwendet einen Verweis auf eine Zelle, die Text statt einem Zahlenwert enthält), „#NAME?“ (in einer Gleichung wurde ein Text oder ein Symbol verwendet, das nicht als Name für einen Zellinhalt definiert wurde) usw. werden standardmäßig zentriert ausgerichtet. Formeln (beginnend mit „=“) werden nicht dargestellt, sondern stattdessen wird der mit ihnen berechnete Wert angezeigt. Nur in der Bearbeitungszeile oberhalb der Tabelle ist die Gleichung sichtbar, wenn die Zelle markiert ist. Sie wird durch einen Doppelklick auf die Zelle sichtbar. In beiden Fällen kann sie bearbeitet werden. Dabei werden evtl. vorhandene Zellbezüge farblich dargestellt und die Zellen, auf die die Bezüge verweisen, entsprechend eingefärbt.

Alle automatische Ausrichtungen können durch manuelle Auswahl der Ausrichtung verändert werden. Die automatische (rechtsbündige) Ausrichtung eines Zahlenwerts können Sie unterdrücken, indem Sie dem Zahlenwert ein Hochkomma „ ‘ “ voranstellen. Dadurch wird ein Zahlenwert formatiert wie ein Text, behält aber seine Eigenschaft als Zahlenwert (d. h. ein Verweis darauf in einer Gleichung führt nicht zum Fehler „#WERT!“). So können auch vorangestellte Nullen dargestellt werden (etwa bei Telefonnummern!), die – wenn sie vor der ersten signifikanten Stelle vor Komma stehen – normalerweise automatisch unterdrückt werden. Das Voranstellen des Hochkommata unterdrückt auch die automatische Formatierung von *Zahlen in Klammern* als negative Werte und bewirkt, wenn es einer Gleichung vorangestellt wird, dass die Gleichung als Text interpretiert und damit lesbar

dargestellt wird (statt das Ergebnis anzuzeigen). Das Hochkomma selbst wird dabei *nicht* angezeigt.

Kalenderdaten wie z. B. „12.03.2021“ und Uhrzeiten wie „10:12“ werden von Excel i. d. R. automatisch erkannt. Dabei verändert Excel tatsächlich aber auch den „Wert“ der Eingabe! Ein Kalenderdatum wird intern nämlich als fortlaufende Zahl in Tagen seit dem „0.1.1900“ dargestellt: Geben Sie z. B. den Zahlenwert 1 in eine Zelle und formatieren Sie die Zelle als „Datum“ (die Einstellung der Zell-Formatierung erreichen Sie leicht, indem Sie [STRG]+[1] drücken), so zeigt Excel „01.01.1900“ an. Uhrzeiten werden als Bruchteile ganzer Tage angezeigt. Ein Zahlenwert von 0,5 wird – umgewandelt in ein Uhrzeitformat – also als „12:00“ oder „12:00:00“ angezeigt (je nachdem, ob mit oder ohne Sekunden). Ein beliebiger Zeitpunkt eines Kalenderdatums, also z. B. 12.03.2021 10:58:21, wird intern als Zahlenwert mit entsprechenden Nachkommastellen gespeichert (hier: 44267,4571875).

Tipp: Berechnen Sie mit Excel, wann Sie 10000 Tage alt sind. Dies dürfte das „Jubiläum“ mit der höchsten ganzen Zehnerpotenz in Ihrem Leben sein, das Sie einen ganzen Tag lang feiern können! Geben Sie dazu Ihr Geburtsdatum in einer Zelle ein und addieren Sie dazu den Wert 10000. Das Ergebnis wird i. d. R. automatisch als Datum formatiert sein. Falls nicht, stellen Sie das Format per Hand (mit [STRG]+[1]) auf ein Datumsformat um.

Die Eingabe von Gleichungen (Formeln) erfolgt ähnlich wie in Ihrem Taschenrechner, mit dem kleinen Unterschied, dass die Formel hier mit einem „=“ begonnen wird. Ansonsten müssen Sie immer daran denken, ausreichend Klammern zu setzen.

Verweise auf Zellinhalte

Ein Verweis, z. B. innerhalb einer Gleichung, auf den Inhalt (Wert) einer anderen Zelle („Zellbezug“) erfolgt, indem man die „Koordinaten“ der Zelle (im Format SpalteZeile, also z.B. „C7“, in der Gleichung ohne Anführungsstriche) angibt. Ein Zellbezug im Format \$Spalte\$Zeile (z.B. „\$C\$7“, mit vorangestelltem „\$“) verweist - auch nach Kopieren der Formel an eine andere Stelle - immer auf dieselbe, angegebene Zelle, man spricht hier von „*absoluter Adresse*“ oder „*absolutem Bezug*“. Wenn Sie im Gegensatz hierzu den Verweis im einfachen Format SpalteZeile („C7“) eingeben, sind die Bezüge „relativ“, das bedeutet: Wenn

Sie die Formel in eine andere Zelle kopieren, werden auch die Zellbezüge, auf die die Formel zugreift, verschoben, so dass immer derselbe Abstand (in Zeilen und Spalten) zur Zelle mit der Formel erhalten bleibt.

Beispiel: Inhalt der Zelle C1 sei „=A1 + B1“. Sie kopieren diesen Inhalt zur Zelle C2 (durch [STRG]+[C] bei der markierten Quell-Zelle und [STRG]+[V] in der Zielzelle). Dann lautet der Inhalt dieser Zelle nach dem Kopiervorgang „=A2+B2“ (vgl. Abb. 1)

	A	B	C	D	E
1	Werte		= \$A\$2 + B2	= A2 + B2	
2	1	2	= \$A\$2 + B2	3	
3	2	3		4	5
4	3	4		5	7
5	4	5		6	9
6	5	6		7	11
7	6	7		8	13
8	7	8		9	15
9	8	9		10	17
10					
11					

Abb. 1 Unterschied zwischen „absoluten“ und „relativen“ Zellbezügen

Es lässt sich auch nur die Zeile *oder* die Spalte als absolute Adressierung festlegen (z.B. „C\$7“ oder „\$C7“), was sehr hilfreich ist, wenn man z. B. in mehreren Spalten mit Formeln auf immer dieselbe Spalte, z.B. mit „x-Werten“ zurückgreifen möchte (dann verwendet man das „\$A1“-Format) oder innerhalb einer Spalte auf einen festen Wert, z. B. den ersten Wert der Spalte oder den Maximalwert, verweisen möchte (dann verwendet man das „A\$1“-Format).

Wenn Sie in einer Formel oder einem „Dialog“ (einem Fenster, das zu irgendeiner Eingabe auffordert) mehrere einzelne - ggf. auch nicht zusammenhängende! - Zellen angeben müssen, trennen Sie diese durch ein *Semikolon* (Beispiel: =QUOTIENT(B1;C9)), ein zusammenhängender Bereich wird hingegen durch Angabe der ersten und letzten Zelle des Bereiches definiert, die durch einen *Doppelpunkt* getrennt werden (Beispiel: =SUMME(B1:B6)).

Insbesondere für die bessere Lesbarkeit von Formeln ist es oft hilfreich, die Funktion „*Namen definieren*“ zu nutzen (s. Abb. 2). Wenn Sie Zellen (deren Inhalten Variablen, deren

Werte durch Formeln berechnet werden, oder Konstanten sein können) Namen zuweisen, können Sie diese Namen in Formeln direkt ohne Bezug zur Zelle angeben. Sie können dem Wert der aktuell aktiven Zelle (oder einem Zellbereich) auch direkt einen Namen zuordnen, indem Sie ihn in das Feld oben links über der Tabelle eintragen, in dem sonst die Zellbezeichnung der gerade aktiven Zelle steht (z.B. „A1“). Während Excel Eingaben in *Zellen* sonst auch akzeptiert, wenn man eine andere Zelle aktiviert (z. B. durch Klick mit der Maus oder durch Bewegung mit den Cursortasten), *muss* die Eingabe *hier* mit Eingabetaste [ENTER] abgeschlossen werden.

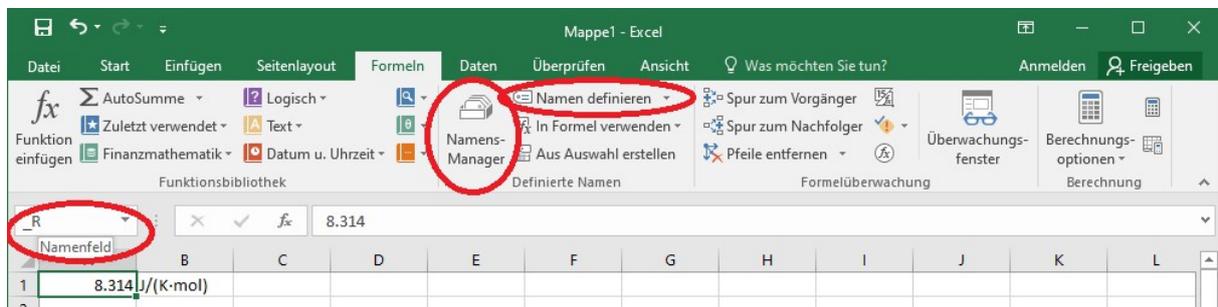


Abb. 2 Namen für Zellen oder Zellbereiche definieren

Sollte einem der genaue Name eines einmal definierten Werts nicht mehr einfallen, bietet [F3] oder [STRG]+[F3] eine gesamte Liste aller Namen (Abb. 3):

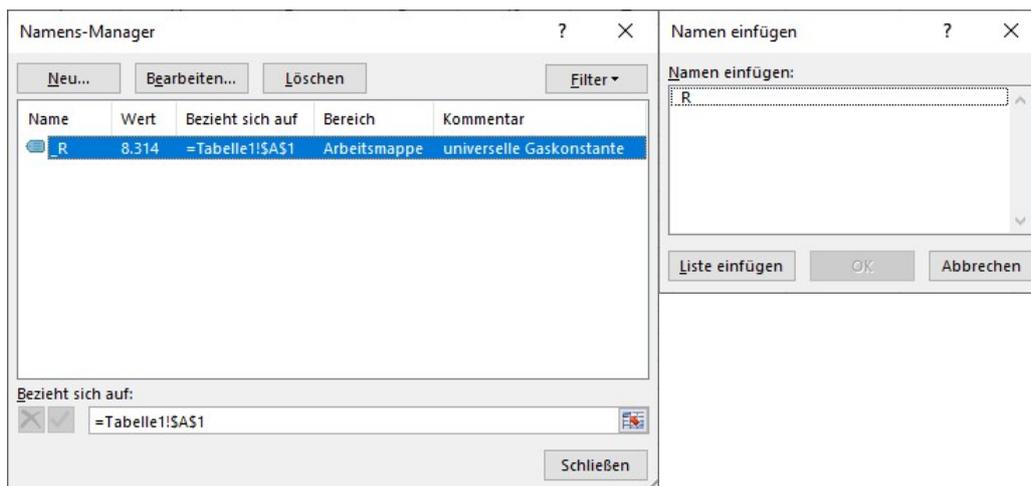


Abb. 3 Der *Namensmanager* [STRG]+[F3] und Funktion „*Namen einfügen*“ [F3] zeigen (u.a.) die Liste der bereits definierten Namen an.

Beachten Sie bei der Benennung, dass Namen, die nur aus einem Buchstaben bestehen oder einem Verweis auf eine Zelle entsprechen (z.B. „R“ oder „A1“) nicht möglich sind. Ggf.

verwenden Sie vor oder hinter einem einzelnen Buchstaben einen Unterstrich („_R“ oder „R_“).

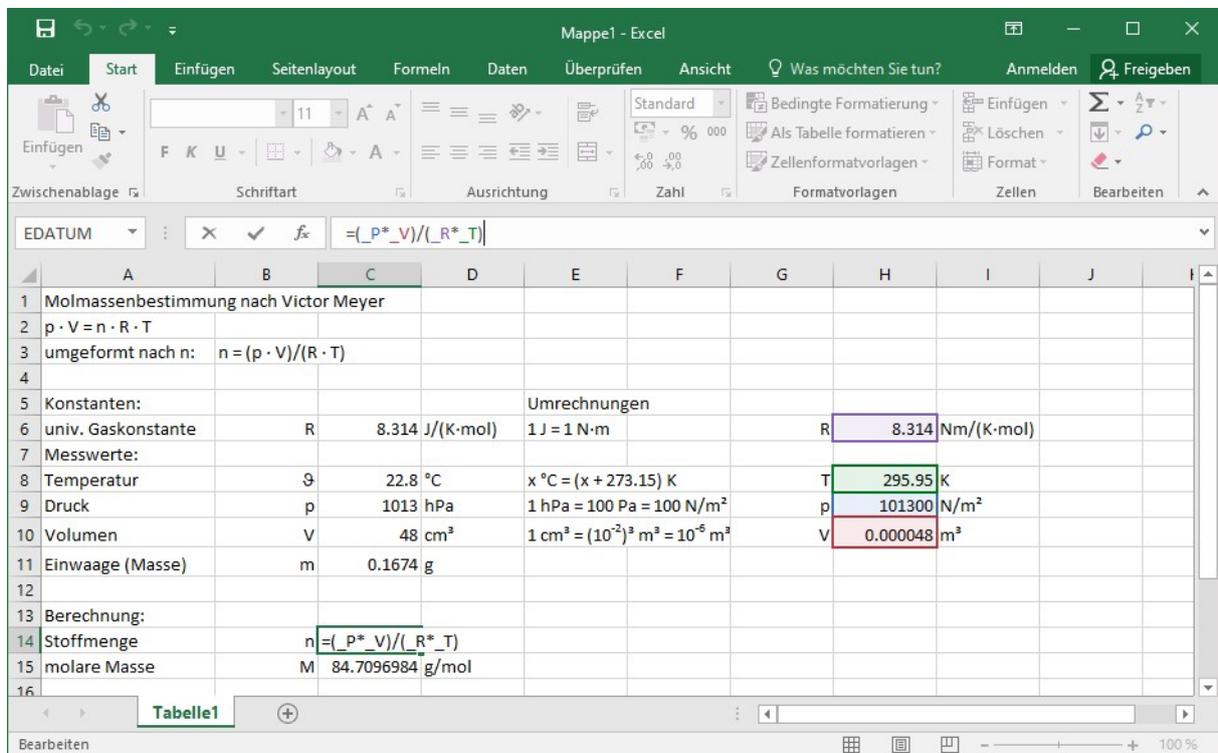


Abb. 4 ...

Übrigens: Weist man einer Zelle (einem einzelnen Wert) einen Namen zu und verwendet diesen Namen in einer anderen Zelle, so entspricht dieses der (absoluten) \$Spalte\$Zeile-Notation.

Arbeiten mit Diagrammen

Beim Erstellen von Diagrammen gibt es einige Funktionen, die ein zügiges Arbeiten erleichtern. So können sie ein Diagramm ohne die Funktion „Diagramm einfügen“ erstellen (zu „Diagramm einfügen“ gelangen Sie in der Registerkarte „Einfügen“ bei Klick auf ein Diagrammsymbol den kleinen Pfeil rechts neben „Diagramme“), indem Sie die Daten markieren und anschließend [F11] (für ein Diagramm als neues Tabellenblatt) oder [ALT]+[F1] (für ein Diagramm auf dem aktuellen Tabellenblatt) drücken. Der voreingestellte Standarddiagrammtyp von Excel ist ein Balkendiagramm. Für wissenschaftliche Graphen

muss der Diagrammtyp i. d. R. ein *Punkt(X,Y)*-Diagramm sein, da nur damit die Abszisse („x-Achse“) mit Werten aus einer Tabelle *skaliert* werden kann und „x,y“-Wertepaare aufgetragen werden können. Daher ist es sinnvoll, vor Verwendung von [F11] bzw. [ALT]+[F1] Ihren *Standarddiagrammtyp* festzulegen:

Hierzu markieren Sie ein beliebiges Diagramm. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Diagramm *oder* auf die Registerkarte „Entwurf“ und wählen Sie „*Diagrammtyp ändern*“. Wählen Sie den Diagrammtyp aus, den Sie als Standard festlegen möchten, klicken Sie aber noch nicht auf OK. Sehen Sie sich den oberen Rand der Registerkarte alle Diagramme an, und suchen Sie das in grau hervorgehobene Diagrammsymbol. Klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Diagrammsymbol, das in grau hervorgehoben ist, und klicken Sie auf „*als Standarddiagramm festlegen*“.

Anschließend wird durch Drücken von [F11] bzw. [ALT]+[F1] immer ein Diagramm dieses Diagrammtyps generiert.

Sollten Sie einmal versuchen, ein Säulendiagramm (etwa mit Häufigkeiten, die z. B. normalverteilt sein könnten) und ein *Punkt(X,Y)*-Diagramm (z. B. eine passende, kontinuierliche Gausskurve) in einem Diagramm zusammen zu bringen, werden Sie feststellen, dass es ein Problem gibt: Säulendiagramme haben nur (y-)„*Werte*“, die *äquidistant* über der x-Achse aufgetragen werden, während beim *Punkt(X,Y)*-Diagramm Ordinatenwerte (y-Werte) gegen *beliebige* Abszissenwerte (x-Werte, aus der Tabelle) aufgetragen werden. Um trotzdem beides gemeinsam in einem Diagramm darzustellen, gehen Sie folgendermaßen vor:

Erstellen Sie das erste Diagramm (z. B. das Säulendiagramm) und fügen anschließend eine weitere Datenreihe hinzu (auf der Registerkarte „Entwurf“ oder nach Rechtsklick auf das Diagramm: „Daten auswählen“ und „*Hinzufügen*“). Dieser neue Datenreihen müssen Sie einen neuen Diagrammtyp zuordnen (z. B. *Punkt(X,Y)*-Diagramm): Rechtsklick auf die Daten der Reihe, „*Datenreihen-Diagrammtyp ändern...*“ wählen. Setzen Sie dabei für die betreffende Datenreihe (hier: „Datenreihen2“) möglichst sofort den Haken bei „*Sekundärachse*“.

ARBEITEN MIT EXCEL

Stand 07.05.2021

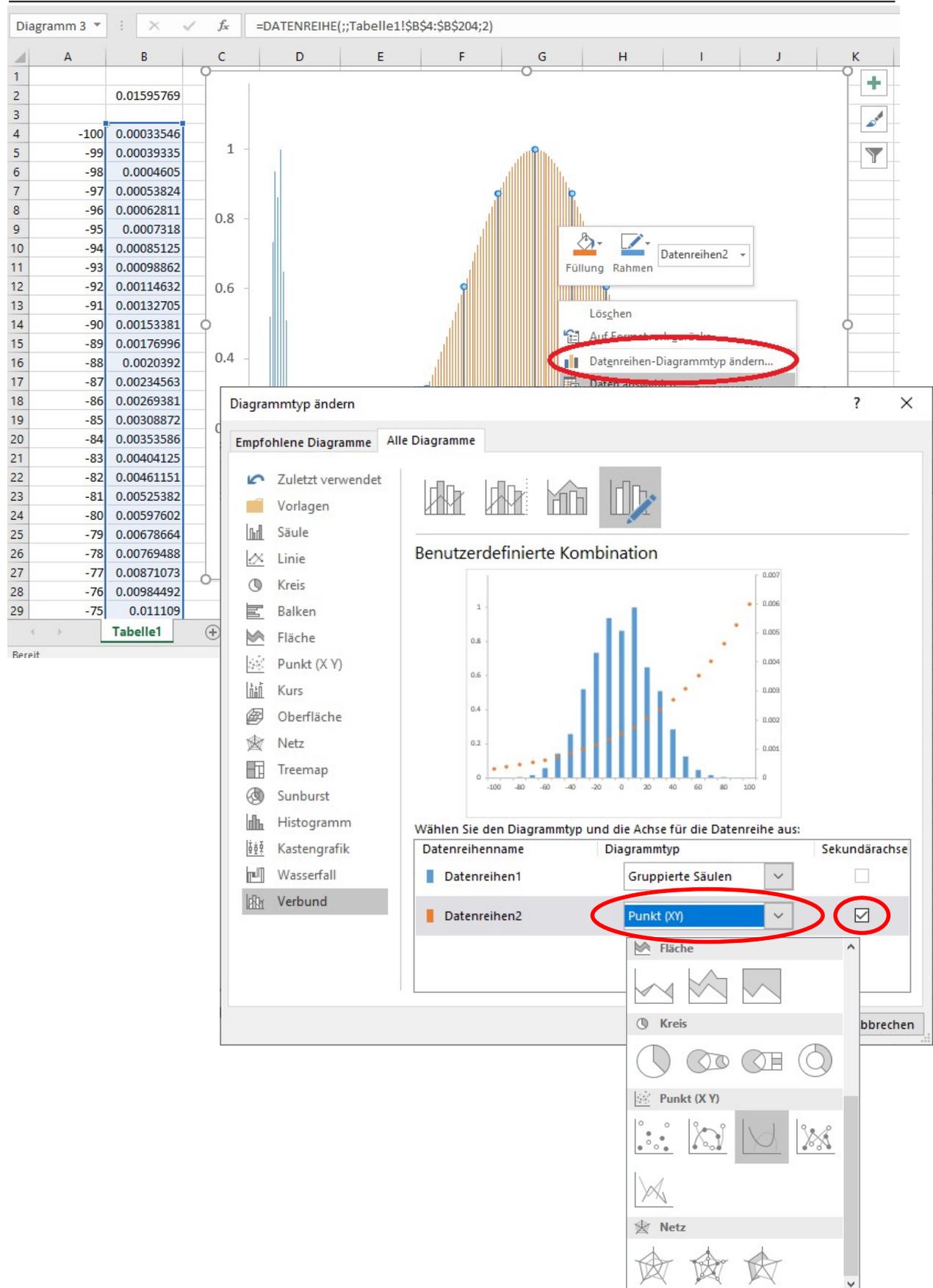


Abb. 5 Ändern des Diagrammtyps nur für die zweite Datenreihe ergibt ein „gemischtes“ Diagramm mit z.B. Säulen- und Punkt(X,Y)-Diagramm. Wählen Sie hier auch gleich „Sekundärachse“ für die 2. Datenreihe.

Erst danach können Sie, erneut mithilfe von „*Daten auswählen*“, dieser Datenreihe die zugehörigen x -Werte zuordnen. Nun sollten Sie ein Säulendiagramm und ein *Punkt(X,Y)*-Diagramm in einem haben, wobei die Diagramme meist deutlich gegeneinander verschoben sind.

Dieses Problem können Sie lösen, indem Sie eine „*sekundäre horizontale Achse*“ (2. Abszisse, „ x -Achse“) einfügen. Leider ist das Erstellen einer zweiten x -Achse in den neueren Excel-Versionen sehr umständlich. Es ist überhaupt erst dann möglich, wenn (a) mindestens zwei Datenreihen dargestellt werden *und* (b) für eine der Datenreihen bereits eine sekundäre y -Achse ausgewählt wurde (daher dies am besten bereits beim Ändern des Diagrammtyps erledigen). Eine sekundäre y -Achse wählt man aus, indem man im Diagramm entweder die entsprechende Datenreihe (Punkte oder Linie) per Rechtsklick anwählt und im Kontextmenü „*Datenreihen formatieren*“ wählt, oder die Datenreihe direkt per Doppelklick anwählt. Beides öffnet die Funktion „*Datenreihen formatieren*“ (am rechten Rand). Falls die Datenreihe bereits markiert war, öffnet der Doppelklick die Funktion „*Datenpunkt formatieren*“, das vorgehen ist aber dasselbe. Nun wählt man in der Einstellung „*Datenreihenoptionen*“ (rechtes Symbol) die „*Sekundärachse*“ aus.

Erst jetzt kann man mit der Funktion „*Diagrammelement hinzufügen*“ auf der Registerkarte „*Entwurf*“ oder mit dem „+“-Symbol rechts oben neben dem (angeklickten) Diagramm eine zweite x -Achse hinzufügen, und zwar über den Menüpunkt „*Achsen*“ und dort „*Sekundär horizontal*“.

Die beiden Achsen müssen dann nur noch ausgerichtet werden, d.h. sie müssen mit gleichen Werten beginnen und aufhören. Dazu müssen Sie die zu skalierende Achse markieren. mit der rechten Maustaste oder per Doppelklick auf die Achse können Sie in das Menü „*Achse formatieren*“ gelangen. Hier finden Sie einen Punkt „*Achsenoptionen*“ und ein weiteres Symbol „*Achsenoptionen*“ (nicht-identische Funktionen), wo sie dann Minimum, Maximum und die Intervalle der Achsenmarkierungen (nicht die Intervalle der Häufigkeitsverteilung!) angeben sowie weitere Eigenschaften der Achsen definieren können.

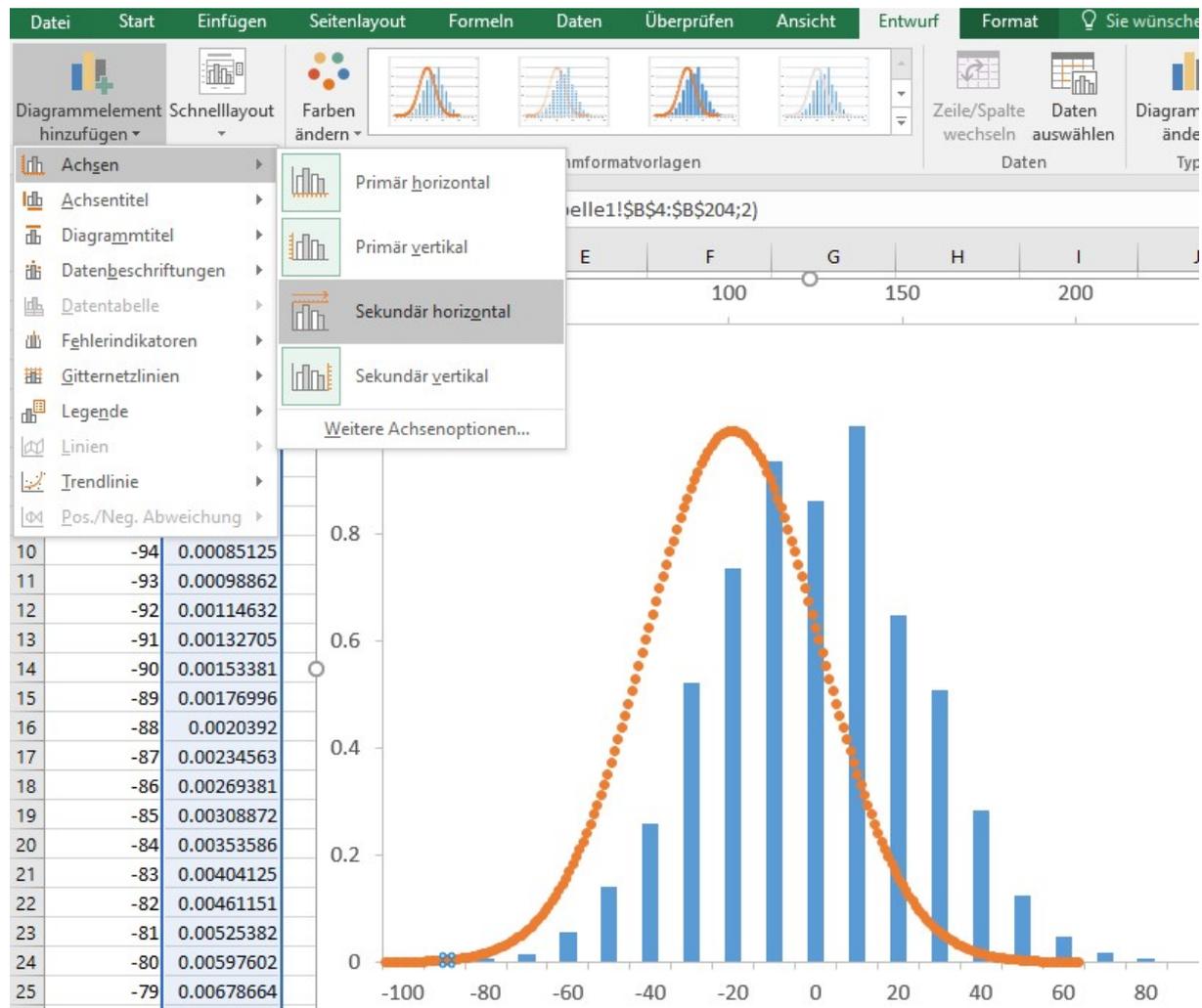


Abb. 6 Hinzufügen einer zweiten Abszisse („sekundäre horizontale“ Achse)

Wenn bei der Erstellung des Säulendiagramms nur die Wertespalte markiert war, ist die Abszisse der Säulen zunächst nur mit aufsteigenden, ganzen Zahlen beschriftet (den Nummern der Säulen). Oft haben die „x-Werte“ der Säulen aber bestimmte Bedeutungen, bei Häufigkeitsverteilungen entsprechen sie den Intervallen, für die die jeweiligen Häufigkeiten angegeben sind. Diese Intervalle, z.B. „[0...10[“ für ein Intervall von Null (eingeschlossen) bis 10 (nicht eingeschlossen), kann man als Achsenbeschriftungen an der „primären horizontalen Achse“ anzeigen lassen. Dazu erstellt man zuerst eine Spalte, in der die Intervallbezeichnungen (in diesem Fall als Text) aufgelistet sind. Wenn man dann im Diagramm per Rechtsklick „Daten auswählen“ wählt, kann man für Datenreihen, die nicht als Punkt(X,Y)-Diagramm aufgetragen sind, rechts im Dialogfenster die „Horizontale Achsenbeschriftung (Rubrik)“ über „Bearbeiten“ aus der Tabelle auswählen (Abb. 7).

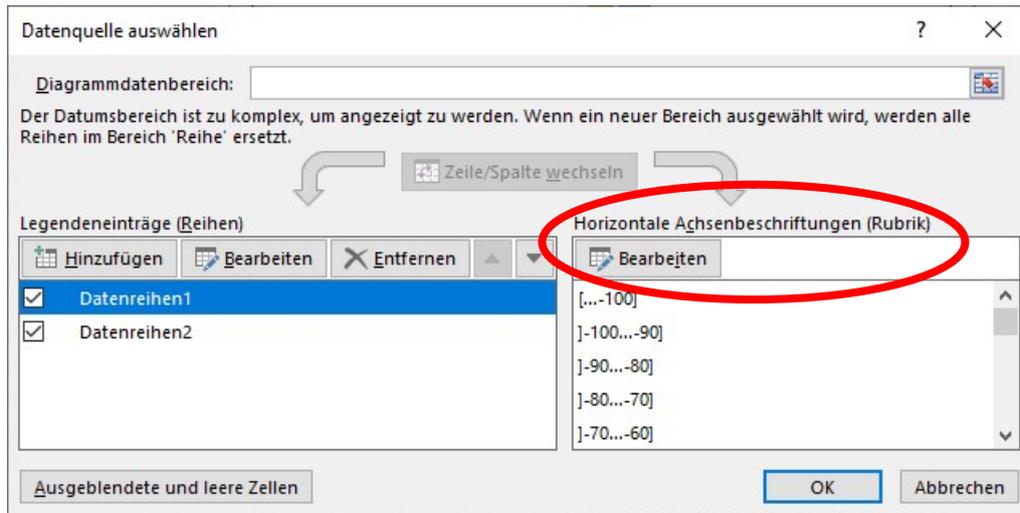


Abb. 7 Einfügen von Beschriftungen für die horizontale Achse des Säulendiagramms

Letztlich könnte ein kombiniertes Säulen- und Punkt(X,Y)- bzw. Liniendiagramm wie in Abb. 8 dargestellt aussehen.

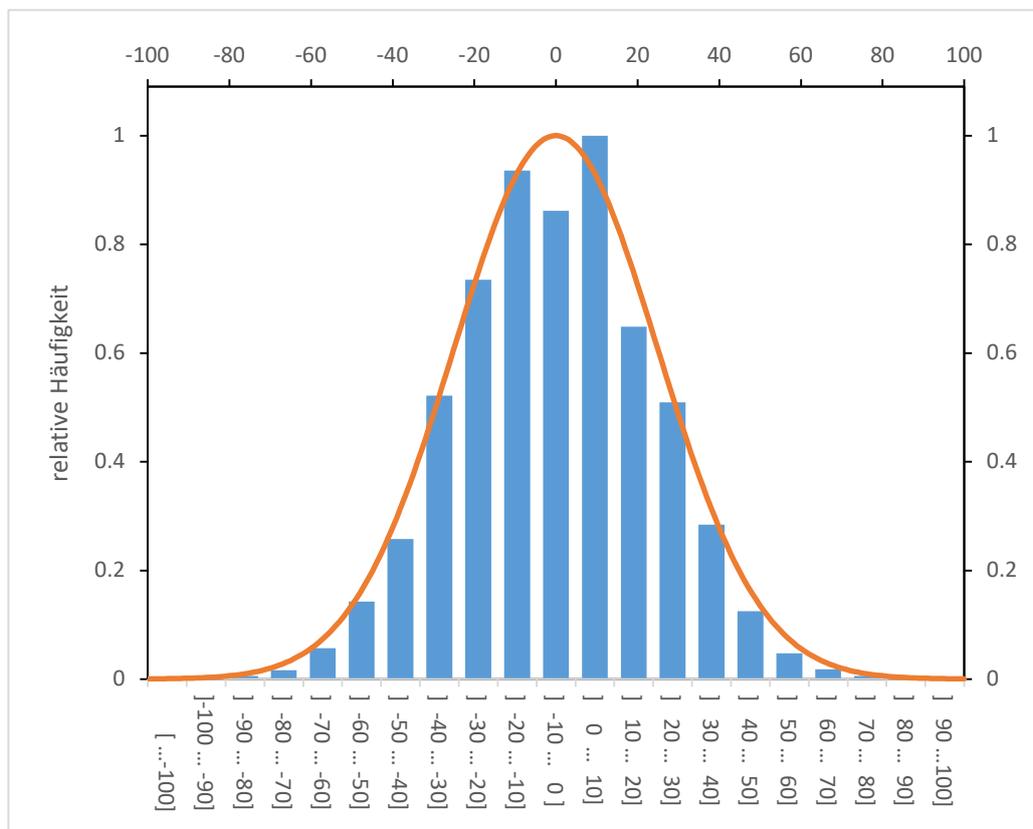


Abb. 8 fertig formatiertes und beschriftetes, kombiniertes Säulen- und Liniendiagramm

2. Formeln/Statistik

Excel bietet einige Funktionen, welche die Eingabe von komplizierten Formeln erleichtert. So besteht die Möglichkeit, einige wichtige Formeln, die zu statistischen Auswertungen nötig sind, einfach mittels integrierter Standardfunktionen zu nutzen.

Hierzu kann man in die Zielzelle die Funktionsnamen direkt eingeben (wenn man sie kennt), z. B.:

Standardabweichung (der Grundgesamtheit):	=STABW.N(Bezug)*
Standardabweichung (einer Stichprobe):	=STABW.S(Bezug)*
Mittelwert	=MITTELWERT(Bezug)
Summe	=SUMME(Bezug)
Median	=MEDIAN(Bezug)

*ältere Versionen von Excel verwenden „STABW“ (bzw. „STABWA“) und „STABWN“

Auch hier kann es von Vorteil sein, vorher den einzelnen Zellen, Spalten oder Zeilen Namen zuzuweisen (s. Abb. 10).

Kennt man die Funktionsnamen nicht, findet man alle in Excel integrierten Funktionen, ggf. gefiltert nach Themengebiet, auch in der Registerkarte „Formel“ unter „Funktion einfügen“ (s. Abb. 9). Dieser Weg öffnet darüber hinaus ein Fenster, in dem man bequem die für die Formel benötigten Werte oder Zellbezüge eingeben oder – durch Klick auf den Knopf mit dem roten Pfeil in der Tabelle, am rechten Rand des jeweiligen Eingabefelds – per Maus in der Tabelle auswählen kann.

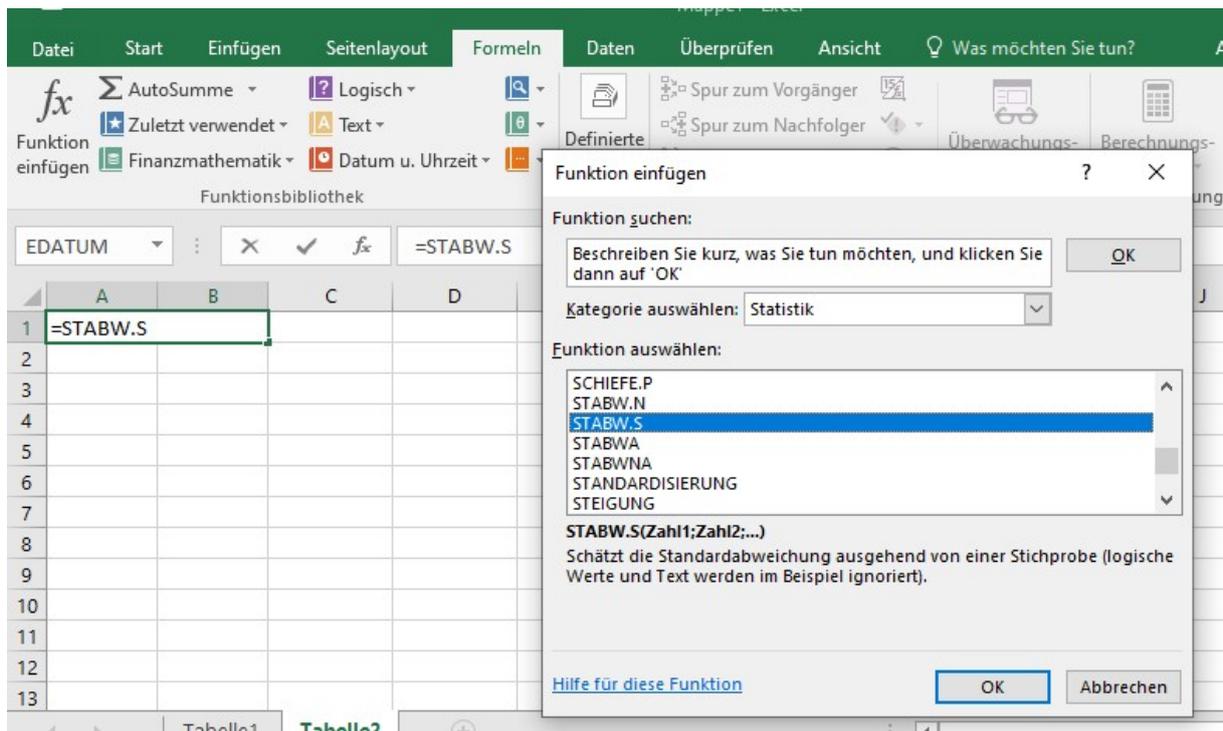


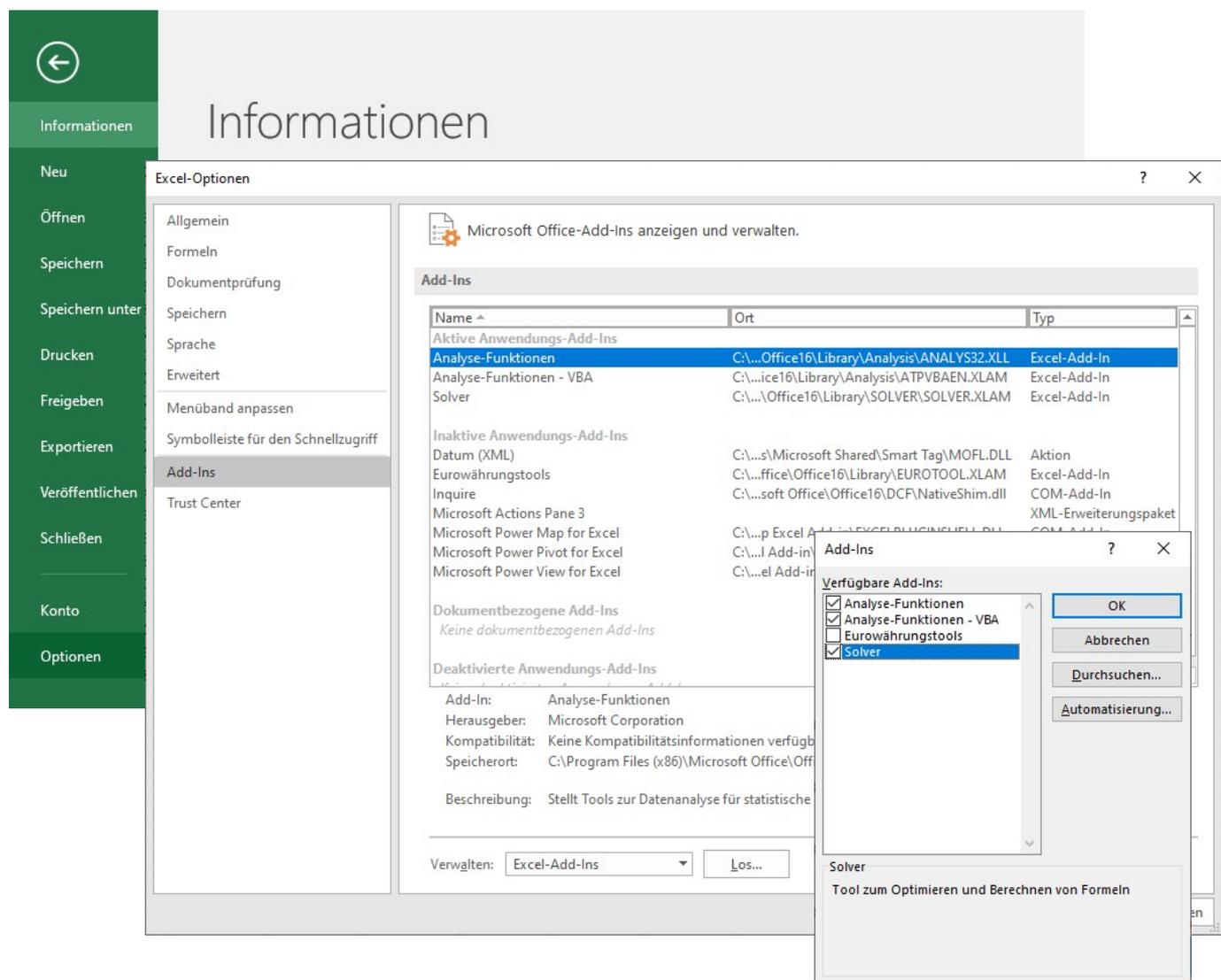
Abb. 9 Alle Funktionen findet man unter „Formeln“ – „Funktion einfügen“

	A	B	C
1	Werte	Quadrate	
2	3	9	Standardabweichung: =STABW.N(A2:A20)
3	5	25	Mittelwert: 5
4	7	49	Summe: 95
5	6	36	Summe der Quadrate: 613
6	8	64	Median: 5
7	4	16	
8	9	81	
9	2	4	
10	1	1	
11	2	4	
12	4	16	
13	8	64	
14	6	36	
15	7	49	
16	1	1	
17	2	4	
18	3	9	
19	8	64	
20	9	81	

Abb. 10 Beispiel für die Verwendung integrierter Standardfunktionen

Hinweis: Falls Sie Informationen zur Art der Berechnung einer dieser integrierten Funktionen wünschen, setzen Sie den Cursor in der Eingabezeile (oben) auf die Funktion. In einem „Tooltip“ erscheint ein blauer Link (s. Abb. 10), der zur Hilfe mit detaillierten Erklärungen zu dieser Funktion führt. Ein Link zur Hilfe für die jeweilige Funktion wird auch im Dialog „Funktion einfügen“ angezeigt (s. Abb. 9).

Ein nützliches Add-In ist die „Analyse-Funktion“, hierbei handelt es sich um Funktionen, die nicht von Beginn an aktiviert sind. Sie sind im Startmenü („Datei“) unter „Optionen“ im Menüpunkt „Add-Ins“ zu finden. Ein Klick auf „Los...“ öffnet ein Benutzerfenster, in dem gewünschte Add-Ins ausgewählt werden können. Empfehlenswert ist neben der Analysefunktion auch der „Solver“, der in Abschnitt 5 erläutert wird. Die gewählten Add-Ins können dann im Menüpunkt „Daten“ genutzt werden.



Wenn (mindestens) eines dieser Add-Ins aktiviert ist, taucht in der Registerkarte „Daten“ die Rubrik „Analyse“ mit den ausgewählten Add-In-Funktionen auf. Mit der *Datenanalyse* (s. Abb. 11) kann man vereinfacht Häufigkeiten ausrechnen und in einem Balkendiagramm („Histogramm“) darstellen lassen (s. Kapitel 1, „Arbeiten mit Diagrammen“) – dies geht grundsätzlich auch ohne die Datenanalyse-Funktionen mit der (*Matrix*¹) Funktion „HÄUFIGKEIT“ und der nachfolgenden Darstellung der Ergebnisse in einem Diagramm.

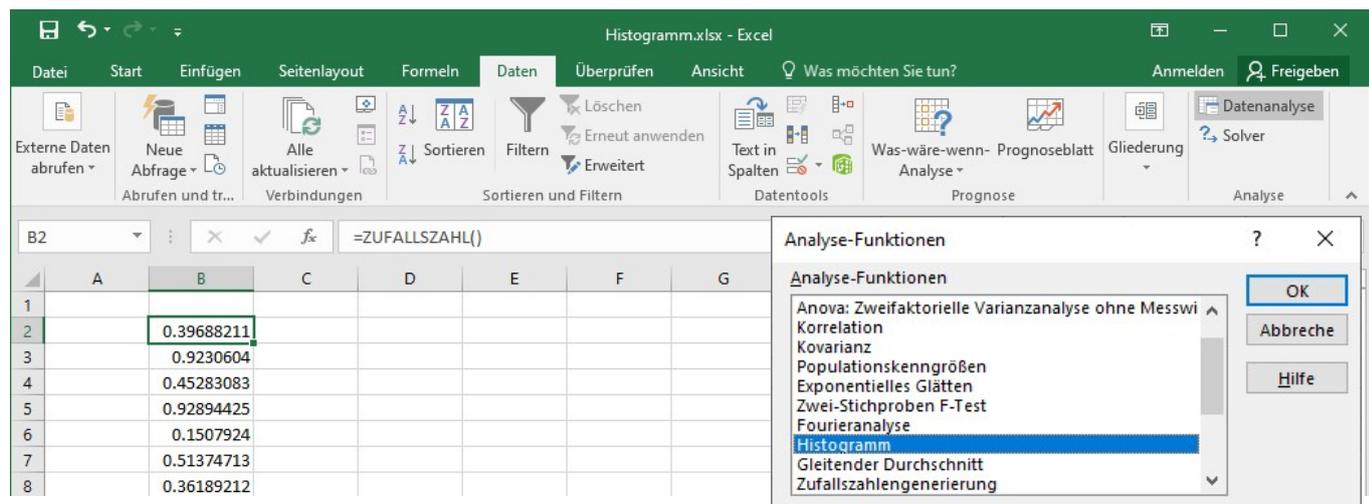


Abb. 11 Solver und Datenanalyse-Funktionen in der Registerkarte „Daten“

Die „Histogramm“-Funktion in der Datenanalyse fasst die Arbeitsschritte aber bequem zusammen. Wenn Sie Ihre Werte in eine Tabelle eingetragen haben und die Häufigkeiten benötigen, mit der die Werte in gewählten Intervallen auftreten, tragen Sie zunächst in eine weitere Spalte – vgl. Abb. 12: Spalte B - Ihre gewählten Intervalle ein (im Beispiel hier: „2,4,6,8,10“ für $x \leq 2$, $2 < x \leq 4$ usw. *Das erste Intervall enthält immer alle Werte kleiner oder gleich der ersten angegebenen Intervallgrenze*).

Tipp: Wenn Sie eine bestimmte Verteilungsfunktion erwarten (z. B. eine Gaussverteilung), wählen Sie die Grenzen der Intervalle äquidistant (gleich weite Intervalle). Ansonsten würde

¹ Die Ergebnisse einer Matrixfunktion füllen mehr als nur eine Zelle aus. Daher müssen alle Zellen, die die Ergebnisse aufnehmen sollen (die Anzahl muss bereits bekannt sein, sie entspricht bei der Funktion „HÄUFIGKEIT“ der Anzahl der „Klassen“, also der Intervalle), markiert werden. Dann wird die Funktion (in der aktiven Zelle) eingegeben und abschließend mit [STRG]+ [ENTER] (statt nur [ENTER]) bestätigt.

die Verteilung verzerrt erscheinen, da ungleich weite Intervalle im Säulendiagramm trotzdem mit gleichen Breiten dargestellt. Insbesondere wenn Sie das Säulendiagramm, wie oben beschrieben, mit einem Punkt(X,Y)-Diagramm einer berechneten Verteilung überlagern wollen, müssen Sie die „Klassen“ für die Häufigkeitsverteilung (Intervallgrenzen) äquidistant wählen.

Starten Sie danach die *Analyse-Funktion* und wählen das "Histogramm".

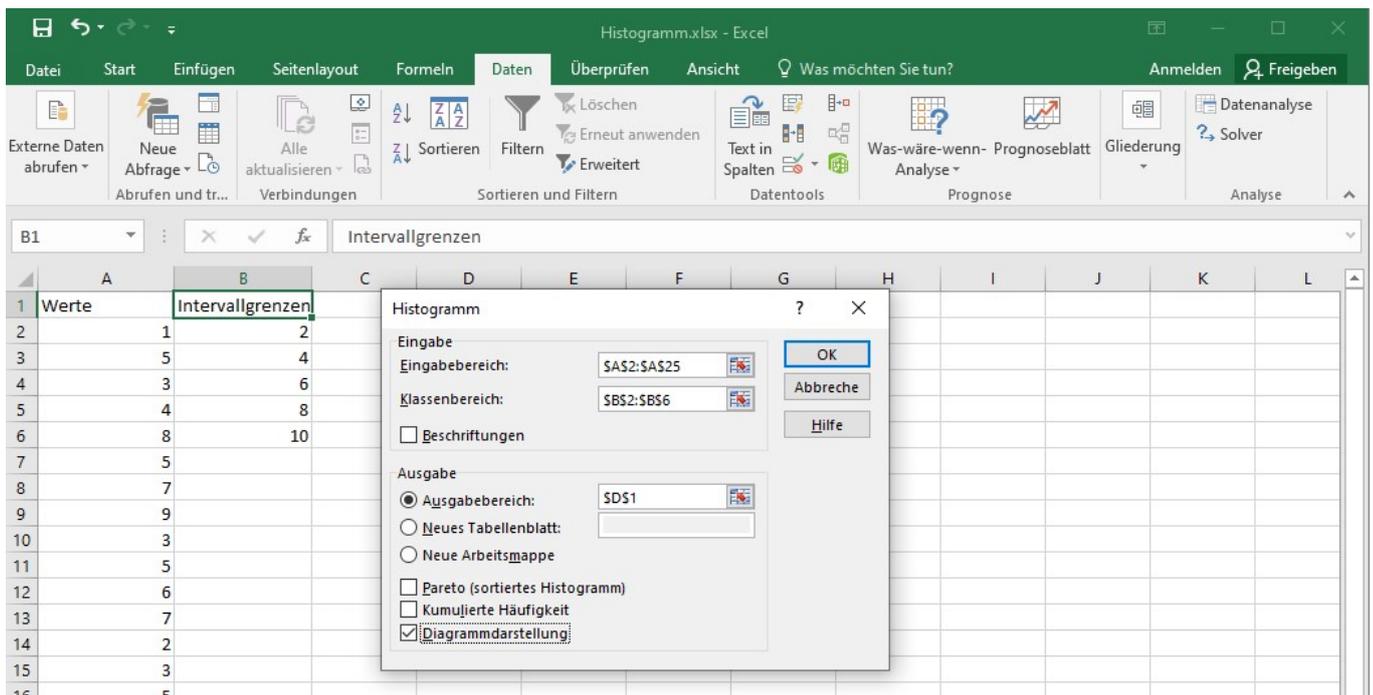


Abb. 12 Verwendung der „Histogramm“-Funktion

„*Eingabebereich*“: Hier wird der Bereich der Bezüge zu den „Werten“ eingegeben. Alternativ kann mit dem Knopf rechts vom Eingabefeld (mit dem roten Pfeil) der Bereich mit der Maus ausgewählt werden.

„*Klassenbereich*“: Hier werden die Bezüge zu den gewählten Intervallgrenzen eingetragen bzw. per Maus ausgewählt. Wenn Sie per Häkchen „*Diagrammdarstellung*“ auswählen, wird nach Klick auf OK neben der Ausgabe der Werte sofort ein Säulendiagramm mit den Häufigkeiten als Balkendiagramm erstellt.

3. Fehlerbalken

Excel bietet Ihnen auch die Möglichkeit, Fehlerbalken in das Diagramm einzutragen:

Markieren Sie zuerst den Graphen, um dann auf der Registerkarte „Entwurf“ bei der Funktion „Diagrammelement hinzufügen“ den Menüpunkt „Fehlerindikatoren“ zu wählen (eine Abkürzung bietet wieder das „+“-Symbol rechts oben neben dem Diagramm, vgl. Abb. 13). Beachten Sie, dass nur für *Punkt(X,Y)*-Datenreihen neben vertikalen Fehlerbalken auch horizontale Fehlerbalken angezeigt werden können. Wählen Sie für die Art der Fehlerindikatoren „weitere Optionen“ oder doppelklicken Sie auf bereits angezeigte Fehlerbalken.

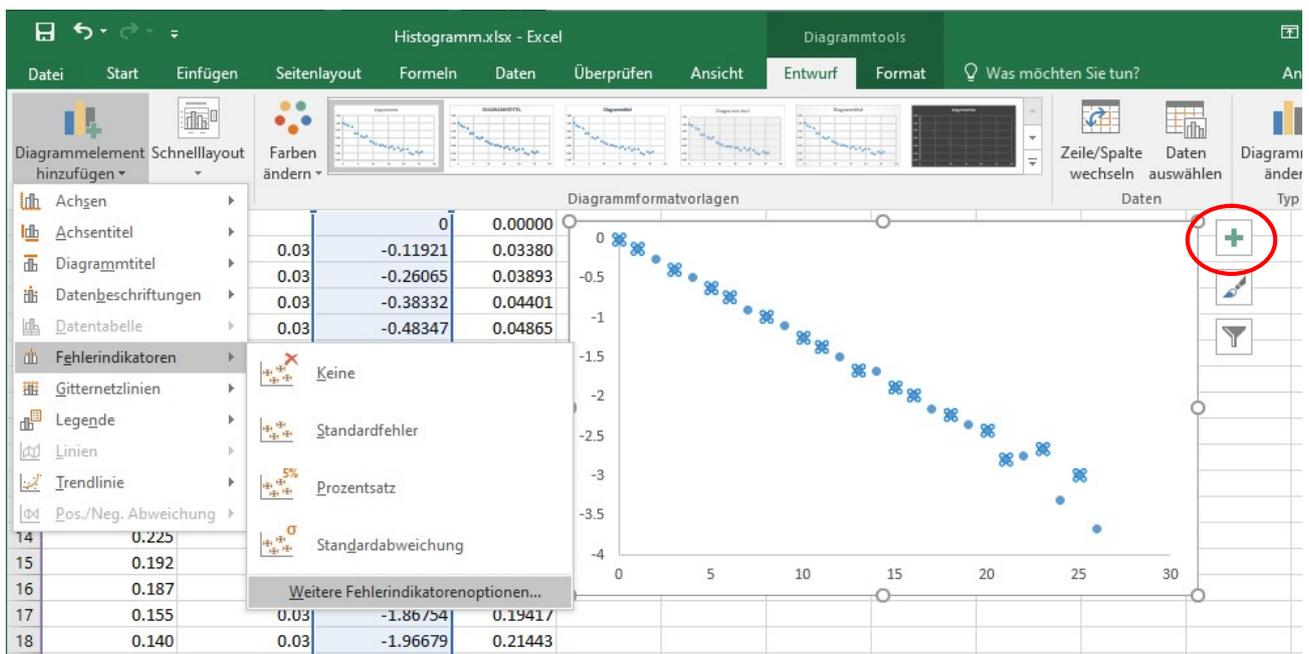


Abb. 13 Einfügen von Fehlerbalken („Fehlerindikatoren“)

Die Fehlerbalken kann man nun formatieren (Funktion „Fehlerindikatoren formatieren“) und, vor allem, ihnen bestimmte Werte z. B. aus der Tabelle zuweisen. Hier wählt man wieder das rechte Symbol („vertikaler Fehlerindikator“ oder „horizontaler Fehlerindikator“, je nach Auswahl) und kann dort unter „Fehlerbetrag“ z. B. feste Werte eingeben oder aber unter „Benutzerdefiniert“ einen Bezug auf Tabellenbereiche herstellen (wenn z. B. für jeden Datenpunkt individuelle Fehlergrenzen vorliegen).

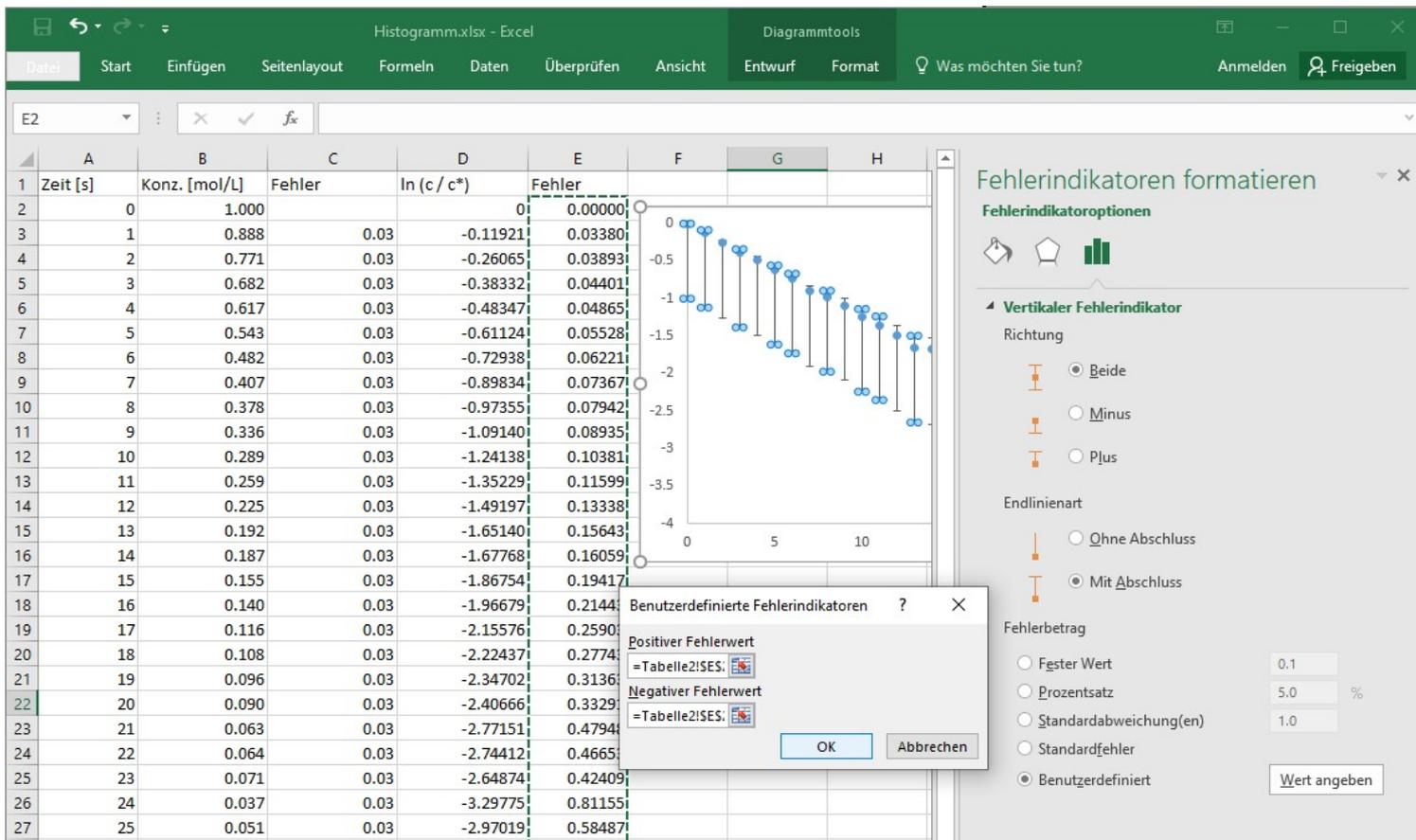


Abb. 14 Mit der Funktion „Fehlerindikatoren formatieren“ lassen sich z. B. feste Fehlergrenzen oder aber – unter „Benutzerdefiniert“ - für jeden Datenpunkt individuelle Fehler aus der Tabelle zeigen.

4. Trendlinie

Excel bietet die Möglichkeit der Regression für „einfache“ Funktionen. Hierzu markieren Sie die gewünschte Datenreihe und wählen über die Registerkarte „Entwurf“ in der Funktion „Diagrammelement hinzufügen“ den Menüpunkt „Trendlinie“ aus (kürzer wieder via „+“ neben dem Diagramm, s. Abb. 15). Es werden verschiedene Funktionen zur Auswahl angeboten. Sie können durchaus mehrere Trendlinien (z. B. mit verschiedenen Funktionen) zur selben Datenreihe darstellen. Unter "Weitere Trendlinienoptionen" oder per Doppelklick auf die Trendlinie können Sie die Darstellung und Funktion Ihrer Trendlinie ändern.

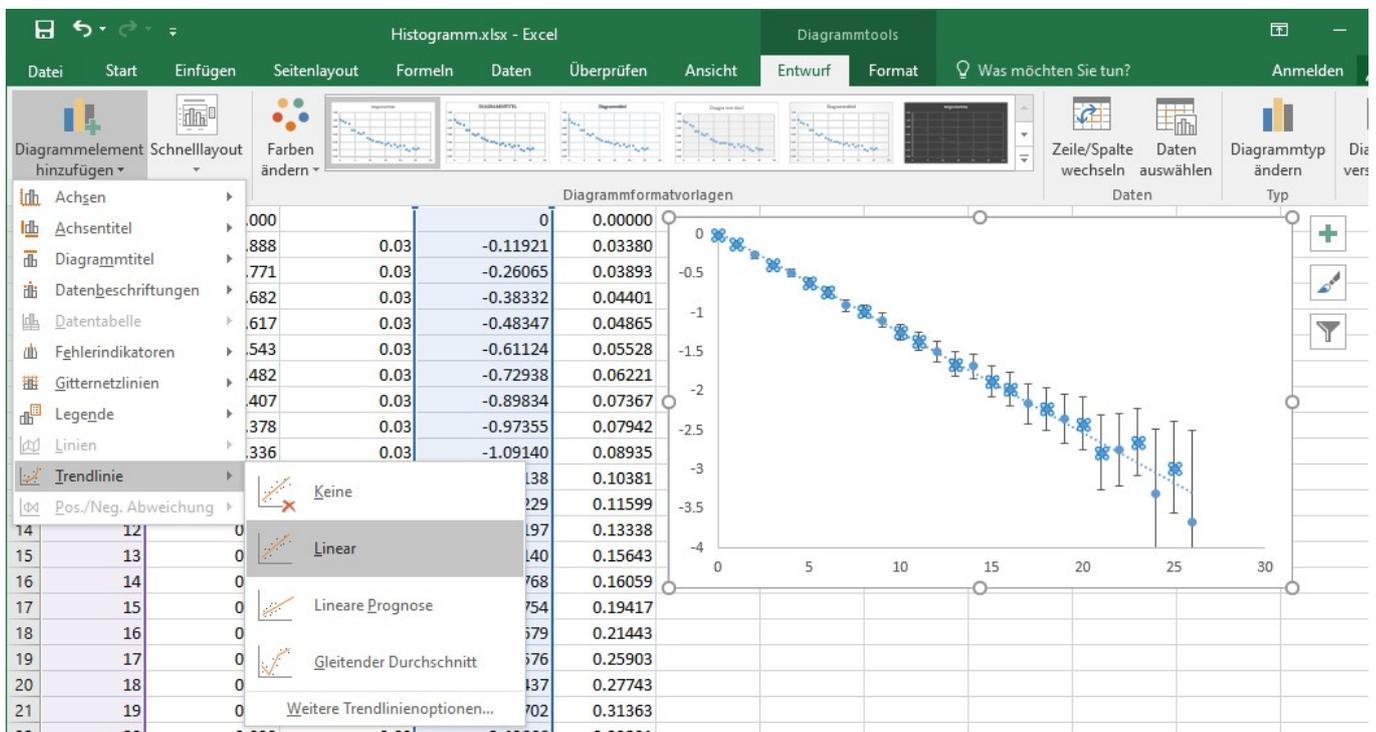


Abb. 15 Hinzufügen einer „Trendlinie“ (lineare oder nicht-lineare Regression für einfache Funktionen)

Außer für die Funktion „gleitender Durchschnitt“ können Sie sich auch die Gleichung der Trendlinie im Diagramm anzeigen lassen. Wenn Sie mit der rechten Maustaste auf diese Gleichung klicken und "Datenbeschriftungen formatieren" oder die Gleichung per Doppelklick anwählen, können Sie (wieder mit dem rechten Symbol) u. a. das Zahlenformat ändern, z. B. "wissenschaftlich" auswählen, falls das erforderlich sein sollte – etwa, um die eine sinnvolle Anzahl *signifikanter* Stellen anzuzeigen. Es sollte aber immer ein sinnvolles Format für die Zahlen gewählt werden. Die Gleichung der Trendlinie wird zunächst

immer in der Form $y=f(x)$ dargestellt, alle dargestellten Koeffizienten sind einheitenlos. Um die Gleichung mit anderen Größensymbolen darzustellen (etwa $U=f(I)$) und die Koeffizienten mit der korrekten Einheit zu versehen (z. B. „V/A“ etc.), kann und muss die Gleichung per Hand korrigiert werden, indem man in das Textfeld der Gleichung klickt und dort den Text entsprechend ersetzt. Vorsicht: Ein einmal per Hand veränderter Text der Trendliniengleichung führt dazu, dass die Gleichung nicht mehr automatisch aktualisiert werden kann, wenn die zugrunde liegenden Werte sich ändern! In dem Fall muss die (geränderte) Trendlinie entfernt und eine neue eingefügt und ggf. entsprechend neu formatiert werden.

Um die Koeffizienten (Steigung und Achsenabschnitt sowie ggf. den Korrelationskoeffizienten) einer Ausgleichsgeraden zu erhalten, brauchen Sie nicht unbedingt eine „Trendlinie“ in das Diagramm einzufügen. Excel verfügt über die Standardfunktionen „=STEIGUNG(y-Werte; x-Werte)“, „=ACHSENABSCHNITT(...)“ und „=KORREL(...)“, die Sie sich in beliebigen Tabellenzellen berechnen lassen können.

Der Korrelationskoeffizient ist ein Maß für die Genauigkeit einer Ausgleichsgeraden. Weichen die Daten vom linearen Verlauf ab („streuen“ sie um die Gerade), so liegt der Korrelationskoeffizient zwischen 0 und 1. Je besser die Messwerte dem linearen Verlauf entsprechen, umso näher an 1 liegt der Korrelationskoeffizient. Ein exakt linearer Verlauf der Datenpunkte hat also einen Korrelationskoeffizienten von exakt 1. Da Excel den Korrelationskoeffizienten aber mit einer bestimmten Anzahl an Stellen angibt, kann durch Rundung auch dann der Wert 1 angezeigt sein, wenn die Daten nicht exakt dem linearen Verlauf entsprechen. Dann ist es sinnvoll, so viele signifikante Stellen anzugeben, dass die Abweichung von 1 gerade erkennbar wird (z. B. vier Nachkommastellen 0,9998 statt nur drei, was durch Rundung zu 1,000 führen würde).

Schwieriger wird es, wenn die Daten nicht den „einfachen“ Funktionen entsprechen, für die Excel automatische Trendlinien berechnet. Um solche Funktionen trotzdem an den Verlauf von Messdaten optimal anzupassen (man spricht statt von „anpassen“ oft auch von „*fitten*“ oder „*anfitten*“ von engl. „to fit“) kann der „*Solver*“ (eine Funktion der Datenanalyse-Add-Ins) genutzt werden.

5. Nichtlineare Regression („Fit“)

Im Folgenden wird das Fitten mit Hilfe des „Solver“ (s. Abschnitt 2) am Beispiel der Langmuir'schen Adsorptionsisothermen erläutert, die die an einer Festkörperoberfläche adsorbierte Menge a als Funktion der Gleichgewichtskonzentration c beschreibt:

$$a = \frac{A \cdot c}{B + c}$$

Zuerst sollten Sie Ihre Messwerte und die benötigten Konstanten A und B mit Einheiten in die Excel-Tabelle eintragen. Tragen Sie dabei die Einheiten immer in separaten (möglichst den Werten benachbarten) Zellen ein, damit Excel die Zahlenwerte als solche erkennt und verarbeiten kann. Auch hier ist es wieder sinnvoll, den Zellen Namen zuzuordnen.

Für die beiden Konstanten A und B werden vorerst willkürliche, aber *bezüglich Größenordnung und Vorzeichen sinnvolle Werte* eingesetzt. Diese Werte benötigt der Solver um seine „Rate-Prozedur“ zu starten. Diese werden später angepasst.

Um beurteilen zu können, was „sinnvolle“ Werte sind, ist es immer hilfreich, sich die (z. B. grafische) Bedeutung der zu bestimmenden Konstanten in der verwendeten Gleichung klarzumachen. Am Beispiel der Langmuir-Isothermen: Der Wert der Gleichung entspricht dann der Konstante A , die eine (adsorbierten) Stoffmenge sein muss, wenn $c/(B+c) = 1$ wird. Das ist für $c \rightarrow \infty$ der Fall. A ist also der Grenzwert der adsorbierten Menge, dem die Messwerte für hohe Konzentrationen entgegenstreben. Er muss also (etwas) größer sein als der Größte Messwert von a . Wenn $c = B$ ist, ergibt sich $a = A/2$. B entspricht also der Konzentration, für den die Messwerte (ungefähr) die Hälfte dieses Grenzwerts A erreicht haben. Oft ist es nicht einfach, sich die Bedeutung der Konstanten oder ihre Auswirkung auf den Verlauf der Kurve klarzumachen. Dann kann man aber ein „Gefühl“ für die Bedeutung bekommen, indem man sich die Auswirkung einer Änderung eines Parameters auf den (berechneten) Kurvenverlauf ansieht. Dazu und um später eine „glatte“ Fit-Kurve in die Messwerte zeichnen zu können, ist es sinnvoll, eine neue Spalte mit Abszissenwerten (x -Werte) anzulegen, in denen die Intervalle höchstens $1/10$ der Intervalle der Messdaten entsprechen. Für diese x -Werte berechnet man dann mit der Fitfunktion und den gewählten

Konstanten die Funktionswerte und trägt sie als neue Datenreihe (als Linie) im selben Diagramm zusammen mit dem Messwerten auf. Da die Konstanten zunächst sicher nicht die richtigen Werte haben, wird die berechnete Kurve deutlich vom Verlauf der Messdaten abweichen. Verändern Sie nun jeweils die Konstanten und beobachten Sie, wie sich der Kurvenverlauf daraufhin ändert. Versuchen Sie auf diesem Weg, „gute“ Startwerte zu erzeugen, für die die berechnete Kurve ungefähr den Verlauf der Messdaten wiedergibt.

Im Beispiel ist die größte adsorbierte Menge 0,0064 mol. Als Startwert für A käme daher z. B. $A = 0,01$ mol in Frage. Die Hälfte davon liegt zwischen den Messwerten für $c = 0.062$ mol/L und $c = 0.1535$ mol/L. Ein guter Start-Schätzwert für B wäre also z. B. $B = 0,1$ mol/L.

In einer weiteren Spalte berechnen wir erneut mit den gewählten Werten der Konstanten die adsorbierte Menge nach der Gleichung der Langmuir'schen Adsorptionsisothermen, allerdings nur für die Konzentrationen der Messdaten. Nur diese Werte sind letztlich für die Benutzung des Solvers nötig (nicht die zuvor berechneten für den „glatten“ Kurvenverlauf).

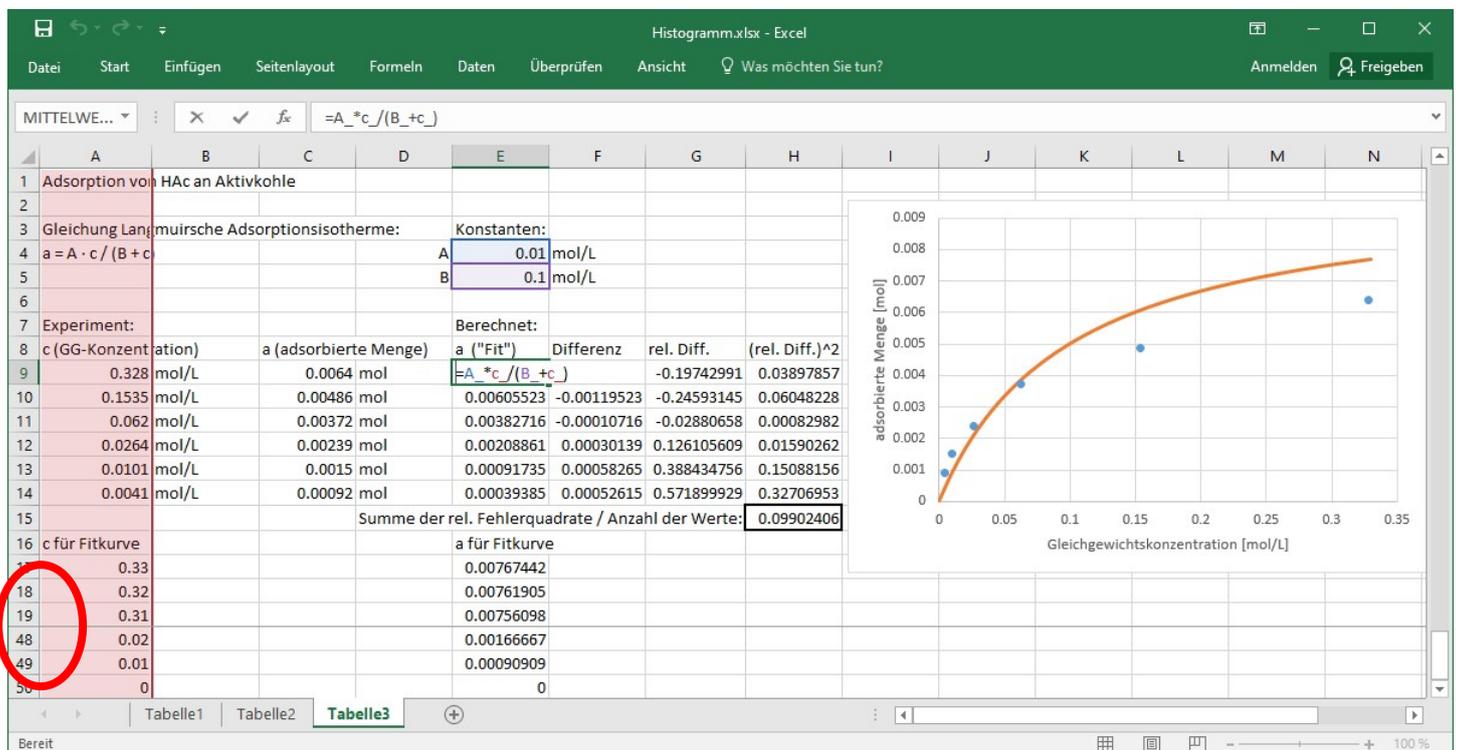


Abb. 16 Beispiel für die Verwendung des „Solver“. Beachten Sie auch die Verwendung der Funktion „Fenster fixieren“ (rote Markierung): Fixiert man in der ersten Zelle der 20. Zeile, wird alles darüber „festgehalten“, während man darunter zu anderen Zeilen „scrollen“ kann.

Aus den *experimentell bestimmten* Werten für die adsorbierten Mengen und den *berechneten* Mengen werden nun relative Fehlerquadrate berechnet: Man bildet die Differenzen von Messwert und berechnetem Wert, teilt durch den Messwert (relativer Fehler des berechneten Werts) und quadriert dieses Ergebnis (da das Vorzeichen der Abweichung keine Rolle spielen soll).

Nun wird in einer Zelle (Abb. 16: H15) die *Summe* dieser relativen Fehlerquadrate berechnet und durch die Anzahl der Werte geteilt. Dieser Wert, der ein Maß für die Qualität des „Fits“ darstellt, ist nun der Ausgangswert, den der Solver minimieren soll.

Starten Sie nun den Solver (in der Registerkarte „Daten“, s. Abb. 17).

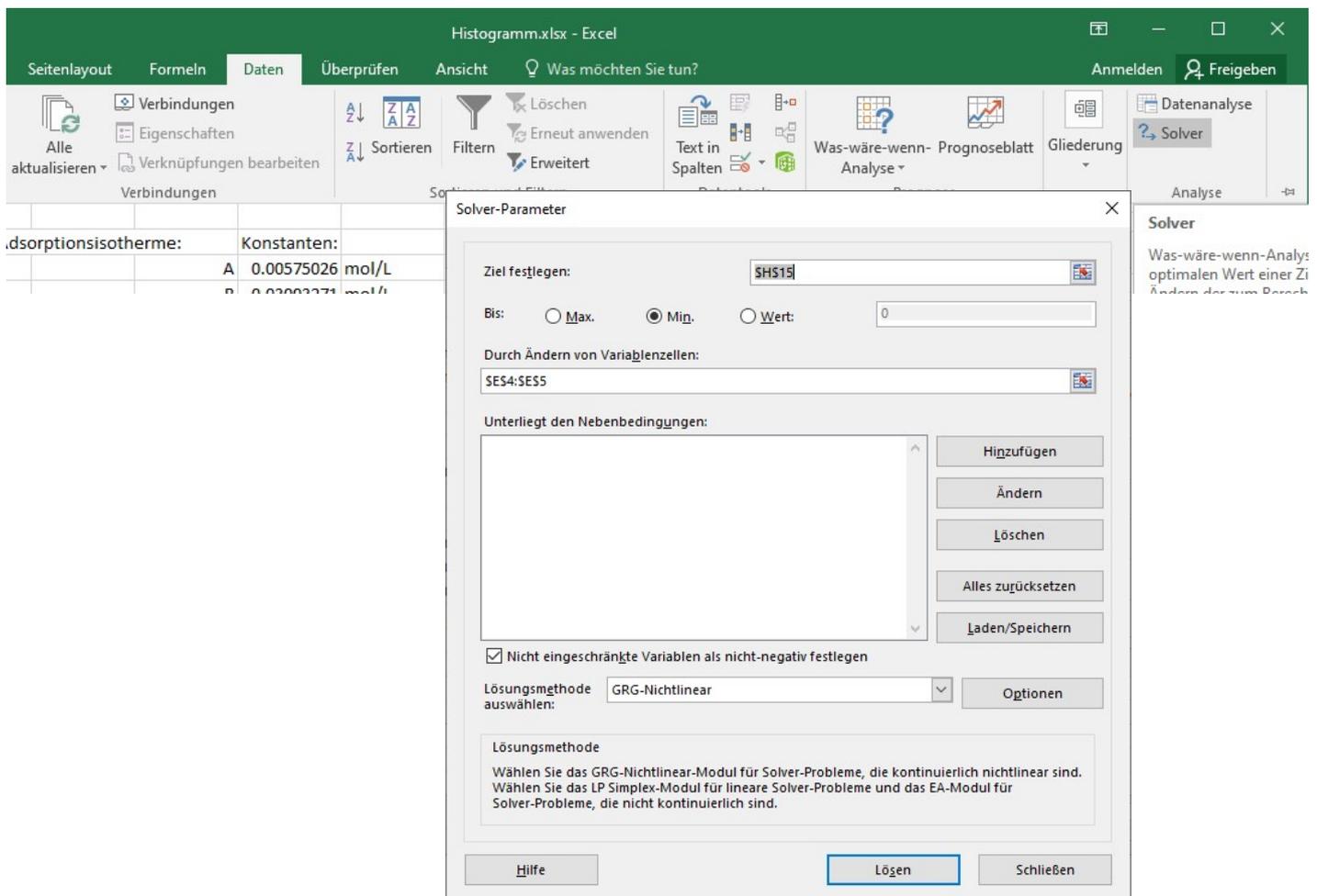


Abb. 17 Benutzung des Solvers zur nichtlinearen Regression

Zielzelle ist die eben berechnete Summe. *Veränderbare Zellen* sind in diesem Fall die Werte für die Konstanten *A* und *B* (E4 und E5). Über die Option *Nebenbedingungen* können Sie

noch Einschränkungen vornehmen (z. B. Ober- oder Untergrenzen der zu variierenden Parameter, keine negativen Zahlen o. ä.). Wenn Sie nun alles eingestellt haben, können Sie mit „Lösen“ den Optimierungsalgorithmus starten, der über „Lösungsmethode auswählen“ festgelegt werden kann. Excel verändert nun solange die Werte von A und B, bis die berechnete Summe der Abweichungen minimal wird.

Nun kann noch gewählt werden, ob man das Ergebnis beibehalten will oder zu den Ausgangswerten zurückkehren will. Erst durch das Akzeptieren der Lösung ist der Optimierungsvorgang abgeschlossen.

Die fertige Tabelle sollte dann so ähnlich aussehen wie in Abb. 18 :

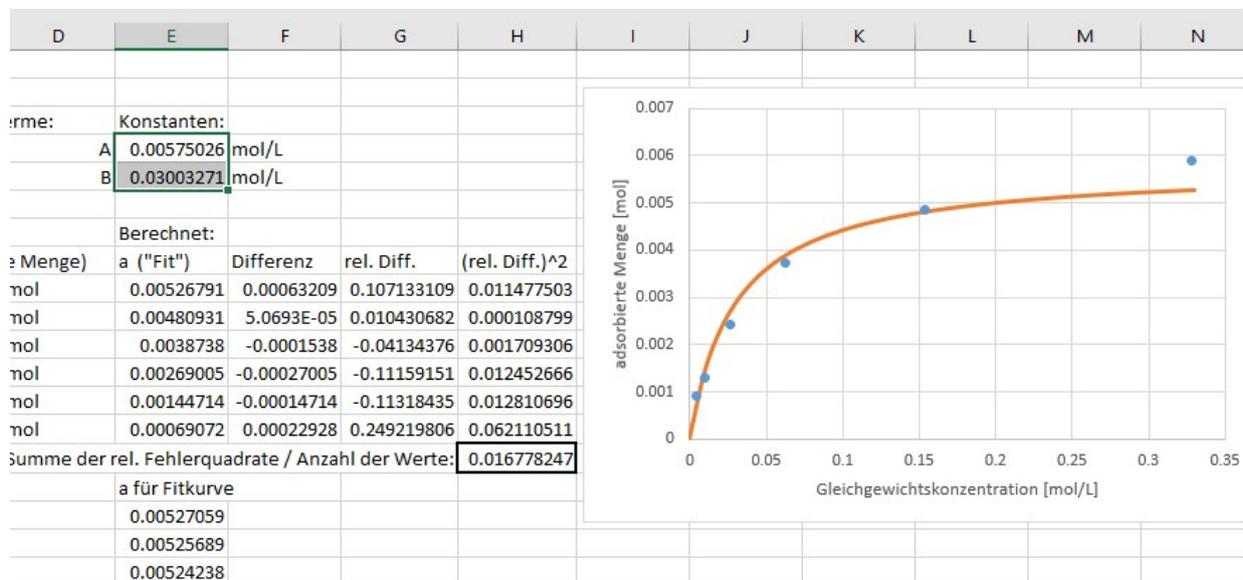


Abb. 18 Mit dem Solver berechnete, angepasste Kurve

Manchmal führen die gefundenen Werte nicht zu einer guten Anpassung der theoretischen Adsorptionsisothermen an die Messwerte. Dies liegt i. d. R. daran, dass die zu Beginn „gerateten“ Ausgangswerte für die Konstanten zu schlecht waren.

Außerdem kann man sich fragen, ob die Wichtung der Abweichungen mit den Kehrwerten der Messwerte (relative Fehler) sinnvoll ist. Eine kleine Abweichung bei einem kleinen Wert des Messwerts wirkt sich so sehr stark auf die zu optimierende Summer der Fehlerquadrate aus, während dieselbe Abweichung für große Messwerte nur eine geringe Rolle spielt. Oft führt daher eine ungewichtete Fehlerquadrat-Summe zu einer besseren Anpassung der Daten (vgl. Abb. 19)

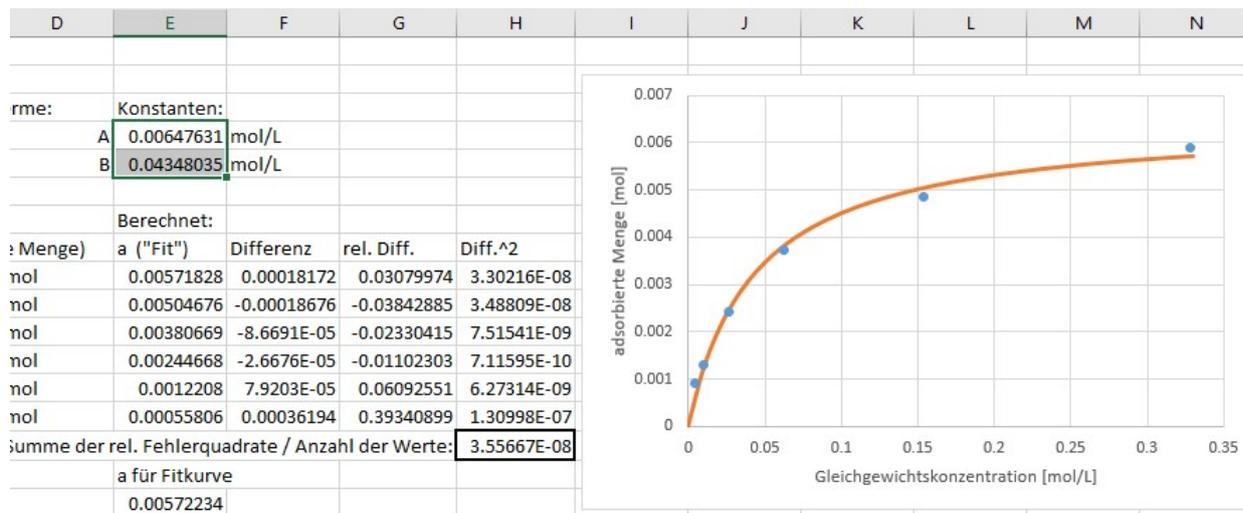


Abb. 19 Ergebnis mit ungewichteter Fehlerquadratsumme

Sollte der zu minimierende Wert bereits sehr klein sein (wie in Abb. 19), variiert Excel die Konstanten u. U. gar nicht mehr. Dann kann man im Dialog des Solvers unter „Optionen“ die „Nebenbedingungs Genauigkeit“ und die „Konvergenz“ (für die gewählte Optimierungsmethode) auf kleinere Werte setzen (Zehnerpotenzen!). Oft erreicht man dasselbe aber leichter, indem man die Fehlerquadratsumme vor dem Optimierungsprozess einfach mit einem entsprechenden Faktor multipliziert (hier z. B. 10^8).