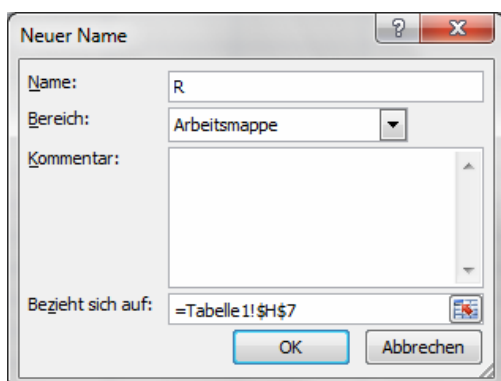
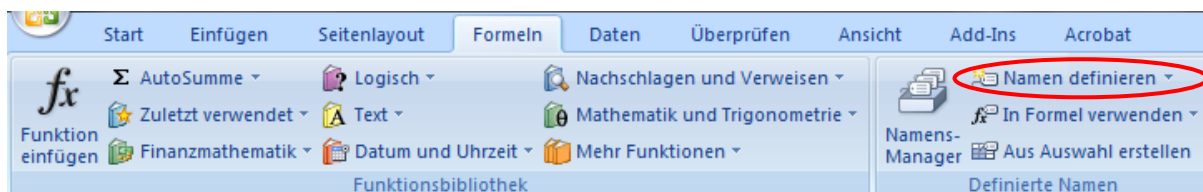


1. Allgemeine Hinweise

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.

Des Weiteren ist es angebracht die Funktion „*Namen definieren*“ zu nutzen. Wenn sie Variablen oder Konstanten Namen zuweisen, können sie diese Namen in Formeln direkt ohne Bezug zur Zelle angeben. Sollte einem der genaue Name nicht mehr einfallen, bietet „F3“ eine gesamte Liste aller Namen.

Hier ein Beispiel:



Die Eingabe von 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.

Arbeiten mit Excel

SUMME		=(p*V)/(R*T)							
	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Molmassenbestimmung nach Viktor Meyer								
2	$p \cdot V = n \cdot R \cdot T$								
3	umgeformt nach n		$n = (p \cdot V) / (R \cdot T)$						
4									
5									
6	Konstanten:					Umrechnungen			
7	Gaskonstante	R	8.314 kJ/(mol*K)		1 kJ = 1000 N*m	R	8314	N*m/(mol*K)	
8	Temperatur	T	296 K			T	296	K	
9	Druck	p	1.013 hPa		1 Pa = 1 N/n ²	p	101300	N/m ²	
10	Volumen	V	0.000048 m ³			V	0.000048	m ³	
11									
12	n =		=(p*V)/(R*T)						
13									

Sollten sie einer Variablen keinen Namen zugewiesen haben, müssen sie Folgendes beachten: Die Eingabe nach der Form \$Spalte\$Zeile (z.B. \$C\$7) verwendet auch beim Kopieren der Formel immer die angegebene Zelle, man spricht hier von einer „absoluten Adresse“. Wenn sie im Gegensatz hierzu SpalteZeile (C7) eingeben sind die Adressen „relativ“. Wenn sie die Formel in eine andere Zelle kopieren, werden auch die Adressen der Zellen, auf die die Formel zugreift mit verschoben.

Beispiel: Inhalt der Zelle C1 sei „=A1 + B1“.

Sie Kopieren diesen Inhalt zur Zelle C2. Dann lautet der Inhalt dieser Zelle nach dem Kopiervorgang „=A2+B2“:

Übrigens: Weist man einem einzelnen Wert einen Namen zu, so entspricht dieses der \$Spalte\$Zeile-Notation. Außerdem kann durch die Notation mit \$ auch nur die Zeile oder nur die Spalte festgelegt werden, je nachdem vor welchem Teil der Adresse das \$-Zeichen steht.

C5		f_x = \$A\$2 + B5			
	A	B	C	D	E
1	Werte		A = \$A\$2 + B2	B = A2 + B2	
2	1	2	3	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	9	10	11	19	
11	10	11	12	21	

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 Standardbefehlen zu nutzen:

Hierzu gibt man einfach in die Zielzelle folgende Formeln ein:

Standardabweichung:	=stabwn(name)
Mittelwert	=mittelwert(name)
Summe	=summe(name)
Median	=median(name)

Auch hier kann es von Vorteil sein, vorher den einzelnen Spalten Namen zu zu weisen. Statt dessen können sie aber auch wie gewohnt den gewünschten Bereich markieren.

D6 fx =MEDIAN(A2:A20)

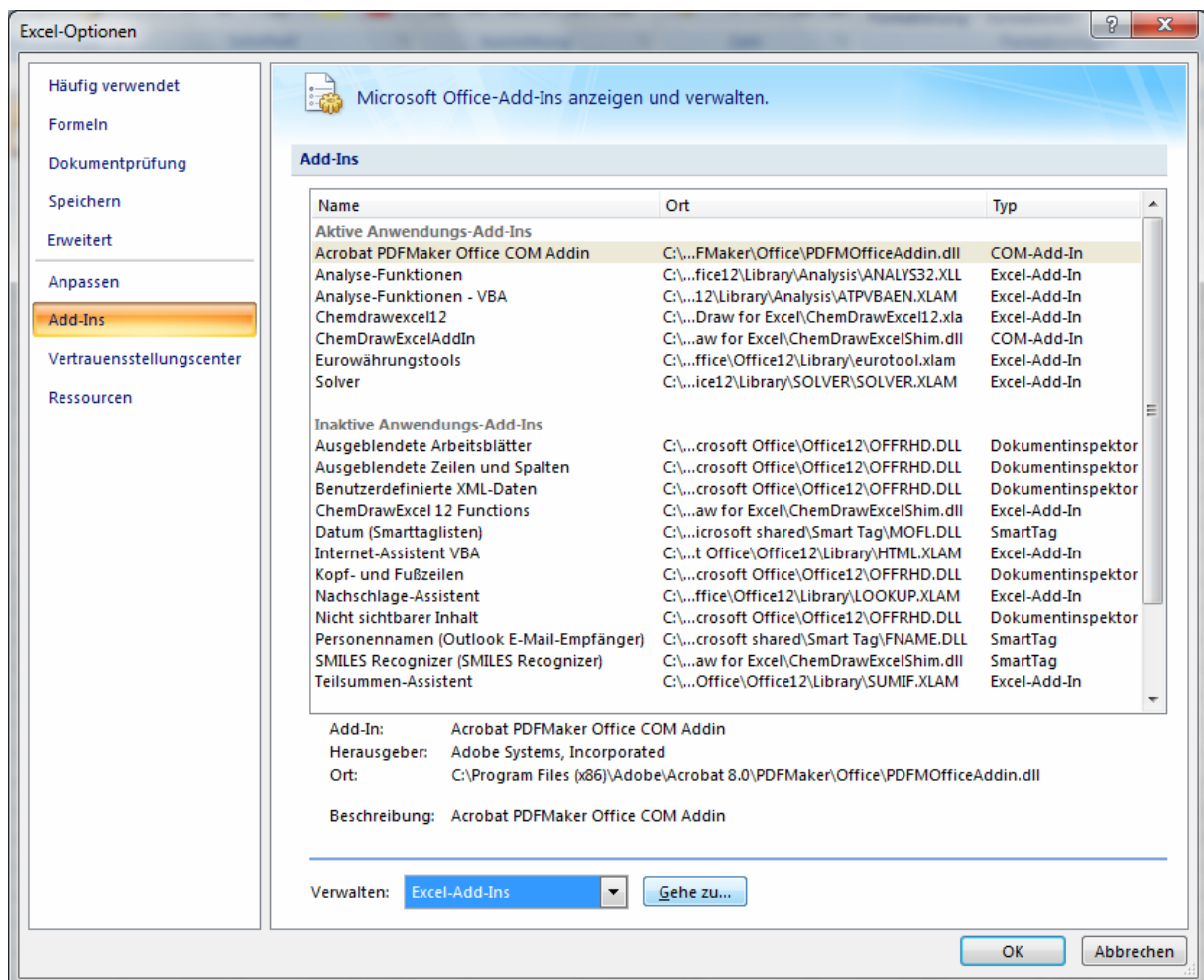
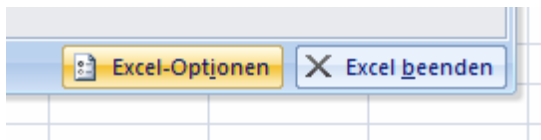
	A	B	C	D
1	Messwerte	Quadrate der Messwerte		
2	3	9	Standardabweichung	2.69502466
3	5	25	Mittelwert	5
4	7	49	Summe	95
5	6	36	Summe der Quadrate	613
6	8	64	Median	5
7	4	16		
8	9	81		
9	2	4		
10	1	1		
11	2	4		
12	4	16		
13	8	64		
14	6	36		
15	7	49		
16	1	1		
17	2	4		
18	3	9		
19	8	64		
20	9	81		
21				
22				

Hinweis: Falls die Art der Berechnung einer dieser statistischen Funktionen überprüft werden soll, einfach mittels „F1“-Taste die Hilfe zu dieser Funktion verwenden.

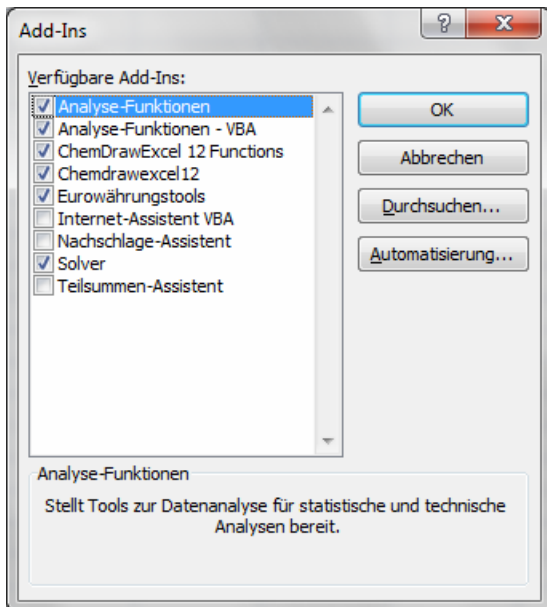
Tipp: Wenn sie in einem Menü mehrere einzelne Zellen angeben müssen, trennen sie diese durch ein *Semikolon* (Beispiel: =QUOTIENT(B1;B2)), ein Bereich wird hingegen durch Angabe der ersten und letzten Zelle des Bereiches definiert, die durch einen *Doppelpunkt* getrennt werden (Beispiel: =SUMME(B1:B6)).

3. Arbeiten mit Diagrammen

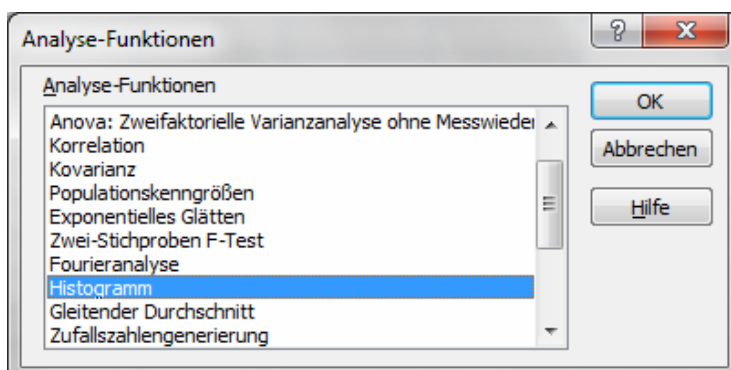
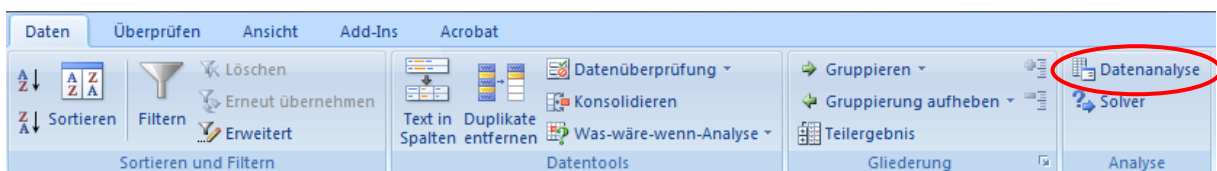
Ein nützliches Add-In ist die "Analyse-Funktion", hierbei handelt es sich um Funktionen, die nicht von Beginn an aktiviert sind. Sie sind im Startmenü unter "Excel-Optionen" im Menüpunkt "Add-Ins" zu finden. Unter "Gehe zu" öffnet sich ein Benutzerfenster, in dem gewünschte *Add-Ins* ausgewählt werden können. Empfehlenswert ist neben der Analysefunktion auch der Solver, der in Abschnitt 6 erläutert wird. Die gewählten *Add-Ins* können dann im Menüpunkt "Daten" genutzt werden.



Arbeiten mit Excel



Mit der *Datenanalyse* kann man problemlos Häufigkeiten ausrechnen und in einem Balkendiagramm darstellen lassen. Wenn sie ihre Werte in eine Tabelle eingetragen haben und die Wahrscheinlichkeiten benötigen, tragen sie zunächst in eine weitere Spalte (im Beispiel unten: Spalte C) ihre benötigten Intervalle ein (im Beispiel hier: $0 \leq x \leq 2$, $2 < x \leq 4$,...als erstes Intervall nimmt Excel immer 0 bis zur ersten Zahl). Starten sie nun die *Analyse-Funktion* und wählen das "Histogramm".

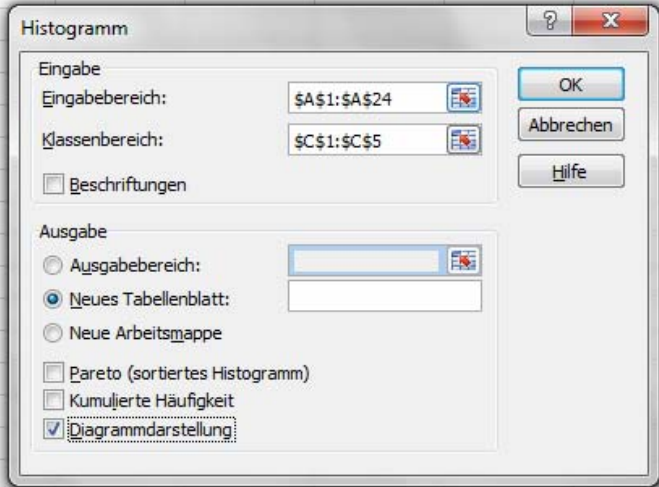


Wenn sie Diagrammdarstellung wählen, wird sofort ein Säulendiagramm mit den Wahrscheinlichkeiten erstellt.

Eingabebereich: gibt die Werte wieder.

Klassenbereich: gibt die gewünschten Intervalle wieder.

	A	B	C	D	E	F	G
1		1		2			
2		5		4			
3		3		6			
4		4		8			
5		8		10			
6		5					
7		7					
8		9					
9		3					
10		5					
11		6					
12		7					
13		2					
14		3					
15		5					
16		6					
17		7					
18		9					
19		8					
20		2					
21		4					
22		6					
23		8					
24		1					



Beim Erstellen von Diagrammen gibt es einige Funktionen, die ein zügiges Arbeiten erleichtern. So können sie ein Diagramm ohne den Diagramm-Assistenten erstellen, indem sie die Daten markieren und anschließend "F11" drücken. Zuvor sollten sie jedoch ihr Standarddiagramm formatieren:

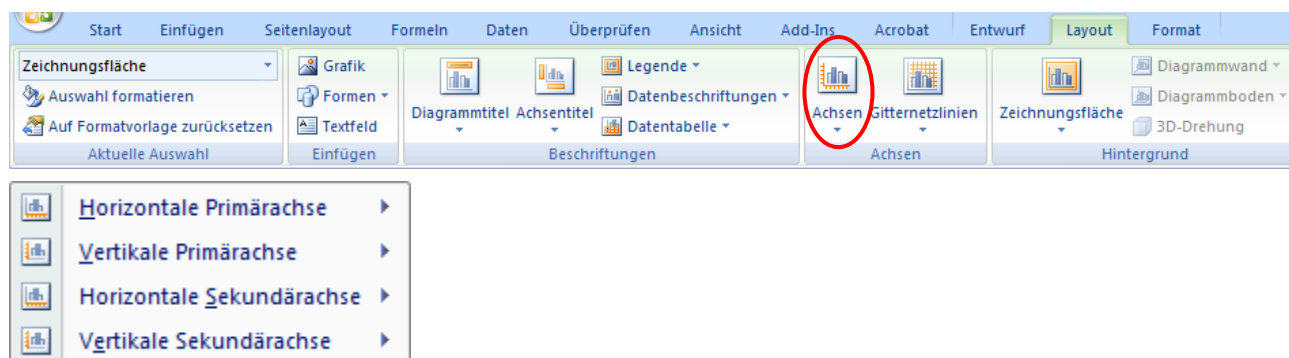
Hierzu erstellen sie ein beliebiges zuvor formatiertes Diagramm und wählen den Menüpunkt "Diagrammtyp ändern". Im Menüfenster können sie nun die Schaltfläche "Als Standarddiagrammtyp festlegen" anklicken. Anschließend wird durch drücken von "F11" immer ein Diagramm dieses Diagrammtyps generiert. Für wissenschaftliche Darstellungen ist häufig ein Punkt(X,Y)-Diagramm als Standarddiagramm sinnvoll.

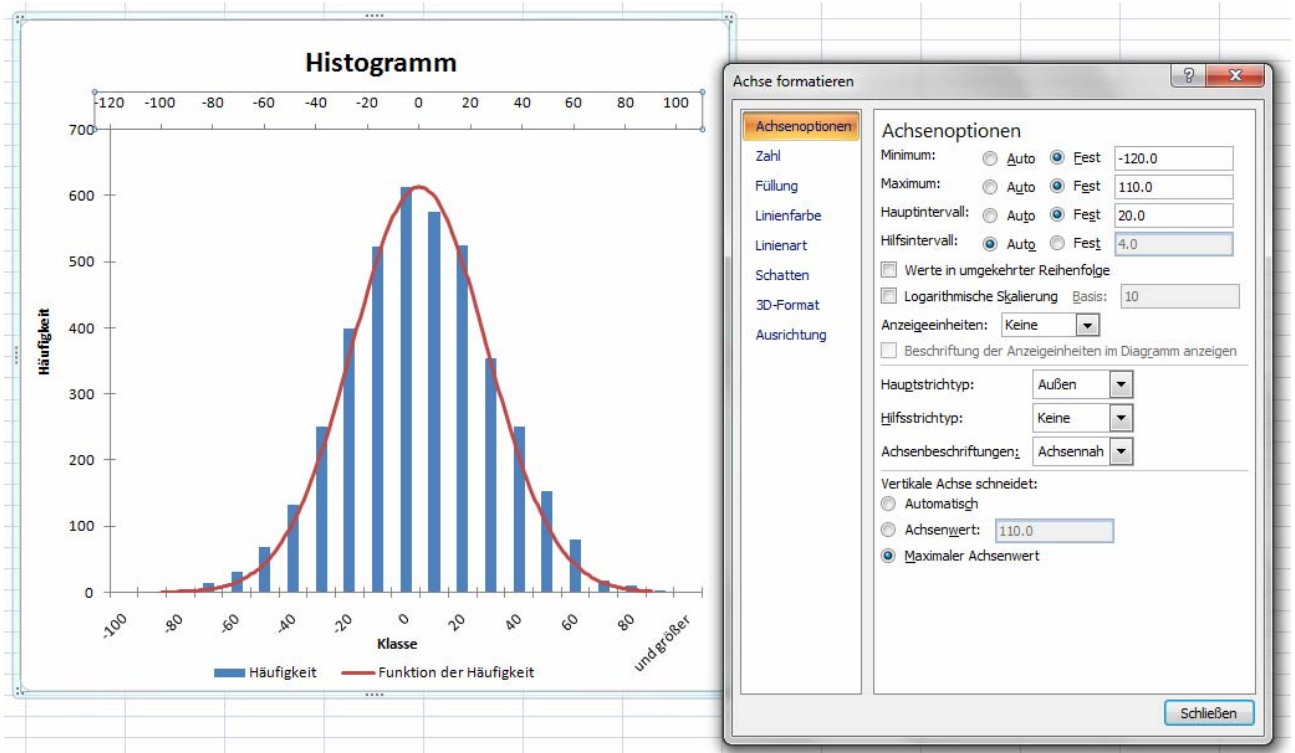
Sollten sie einmal versuchen, ein Säulendiagramm (etwa mit Häufigkeiten) und ein Kurvendiagramm in einem Diagramm zusammen zu bringen, werden sie feststellen, dass es ein Problem gibt: Säulendiagramme haben eine x-Achse, auf der Bereiche aufgetragen werden, während beim Kurvendiagramm Zahlen aufgetragen werden. Hierzu erstellen sie das erste Diagramm (z.B. das Säulendiagramm), fügen anschließend eine weitere Datenreihe hinzu (über Daten auswählen und "Hinzufügen"). Diese Datenreihe müssen sie neu formatieren (z.B. als *Punkt(X,Y)*-Diagramm), woraufhin sie dann die restlichen Y-Werte als Datenquelle anfügen können. Nun sollten sie ein Säulendiagramm und ein Punkt(X,Y)-Diagramm ein Einem haben, wobei die Diagramme meist deutlich verschoben sind.

Dieses Problem können sie lösen, indem sie eine „sekundäre x-Achse“ einfügen. Dies ist unter dem Menüpunkt Layout (unter Diagrammtools) möglich. Dazu zuerst die zweite Datenreihe auswählen und "Auswahl formatieren" wählen. Dort kann nun unter "Reihenoptionen" eine *Sekundärachse* gewählt werden. Diese kann unter dem Menüunterpunkt "Achsen" genauer formatiert werden:

Wichtig: Die Intervalle bei dem Balkendiagramm müssen *äquidistant* sein, also immer gleich große Bereiche abdecken.

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 können sie dann in das Menü "Achse formatieren" gelangen. Außerdem kann man die Achsen auch im Menüunterpunkt "Achsen" genauer formatiert werden, durch Auswahl "weiterer Optionen" gelangt man auch hier zum Fenster "Achsen formatieren".





Hier finden sie einen Punkt „Achsoptionen“, wo sie dann Minimum, Maximum und Intervalle angeben können und die gesamten Eigenschaften der Achsen definieren können.

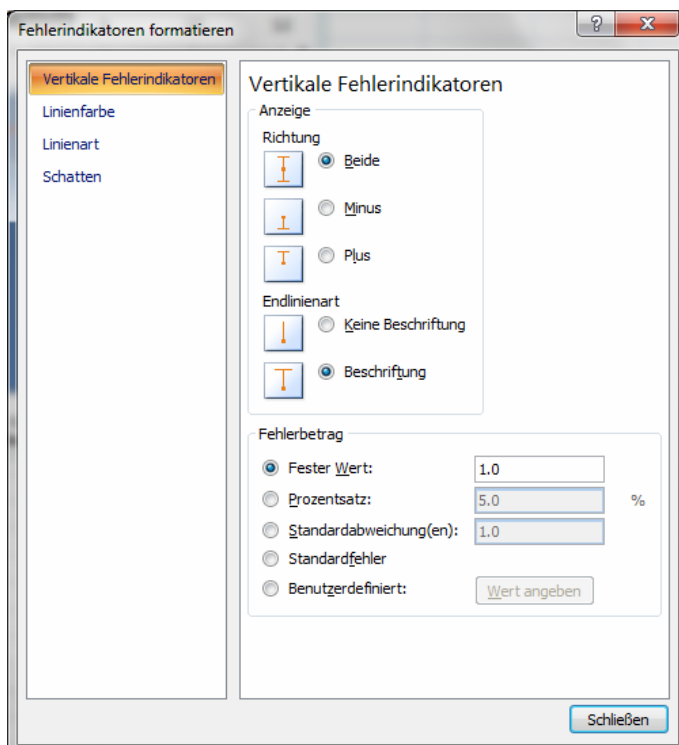
4. Fehlerbalken

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

Markieren sie zuerst den Graphen, um dann im Menüpunkt "Layout" den Unterpunkt „Fehlerindikatoren“ zu wählen:



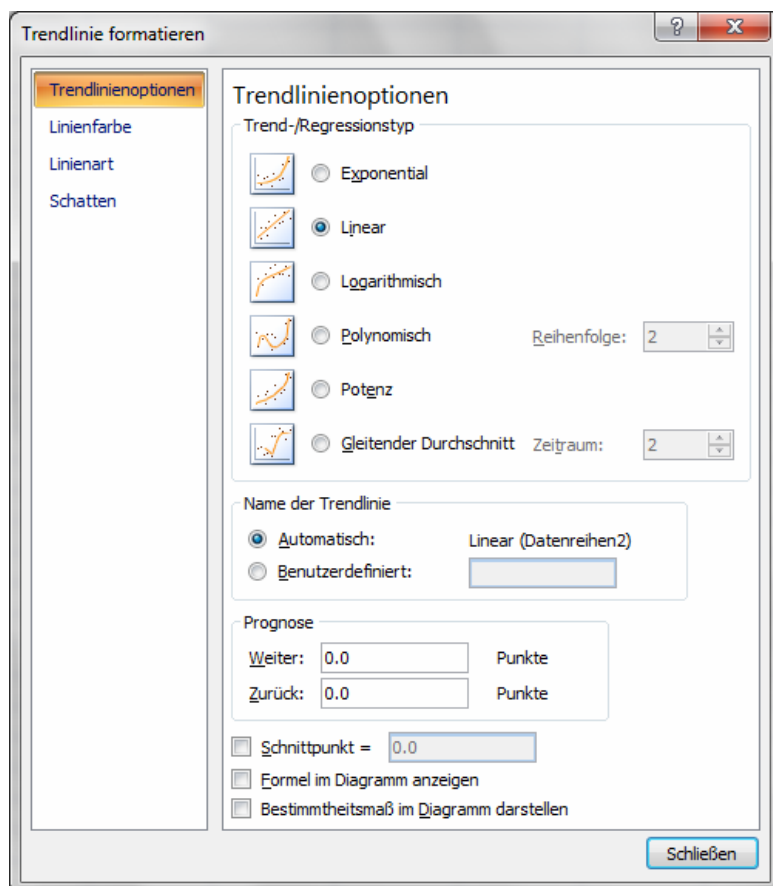
Hier kann man eine grobe Auswahl treffen oder unter "weitere Fehlerindikatoroptionen..." unterschiedliche Definitionen für die Fehler angeben.



Unter "Benutzerdefiniert" kann man auch z.B. aus einer Rechnung erhaltene Werte als Werte für die Fehlerbalken angeben.

5. Trendlinie

Excel bietet Ihnen die Möglichkeit der Regression für "einfache" Funktionen. Hierzu markieren Sie den Graphen und wählen im Menü Layout den Menüpunkt "Trendlinie". Unter "Weitere Trendlinienoptionen" können sie nun die Form Ihres idealen Graphen angeben:



Hier können sie sich unter anderem die Gleichung der Trendlinie im Diagramm anzeigen lassen. Wenn Sie mit der rechten Maustaste auf diese Gleichung klicken und "Datenbeschriftungen formatieren" wählen, können sie das Zahlenformat "wissenschaftlich" auswählen, falls das erforderlich sein sollte. Es sollte aber immer ein sinnvolles Format für die Zahlen gewählt werden.

Mit "=korrel(Werte)" kann man den Korrelationskoeffizienten einer Gerade ausrechnen. Der Korrelationskoeffizient ist ein Maß für die Genauigkeit einer Gerade. Je eher die Messwerte

einer Gerade angenähert sind, um so eher wird der Korrelationskoeffizient den Wert 1 erreichen.

Wenn sie die Steigung mehrerer Reihen benötigen und nicht den „Umweg“ über ein Diagramm gehen möchten, können sie sich auch der folgenden Funktionen bedienen:

„=Steigung(y-Werte;x-Werte)“ berechnet die Steigung der Werte in den Klammern.

„=Achsenabschnitt(y-Werte;x-Werte)“ berechnet den Achsenabschnitt.

Weitere solcher Funktionen finden sie in der Online-Hilfe von Excel.

Schwierig wird es, wenn die Daten nicht solch einfachen Funktionen entsprechen. Um solche Graphen zu fitten kann der „*Solver*“ genutzt werden.

6. Nichtlineare Regression („Fit“)

Im Folgenden wird das Fitten am Beispiel der Langmuir'schen Adsorptionsisothermen erläutert: Zuerst sollten sie ihre Konstanten und Variablen mit Einheiten in die Excel-Tabelle eintragen.

G20		fx		=F20/A20^2					
	A	B	C	D	E	F	G	H	
1	Adsorption von Hac an Aktivkohle								
2	Adsorbierte Menge		Konz		Konstanten				
3	0.0064 mol		0.328 mol/L		A		B		
4	0.00425 mol		0.1535 mol/L		0.01 mol		0.01 mol/L		
5	0.00372 mol		0.062 mol/L						
6	0.00239 mol		0.0264 mol/L						
7	0.0015 mol		0.0101 mol/L						
8	0.00092 mol		0.0041 mol/L						
9									
10									
11									
12									
13	Gleichung für Langmuir								
14	$a = A * c / (B + c)$								
15									
16									
17									
18									
19	Adsorbierte Menge - exp		Adsorbierte Menge - berechnet		Differenz	Differenz^2	gew. Diff^2		
20	0.0064 mol		0.009704142 mol		0.00330414	1.09174E-05	0.26653697		
21	0.00425 mol		0.009388379 mol		0.00513838	2.64029E-05	1.46175451		
22	0.00372 mol		0.008611111 mol		0.00489111	2.3923E-05	1.728738		
23	0.00239 mol		0.007252747 mol		0.00486275	2.36463E-05	4.13968783		
24	0.0015 mol		0.005024876 mol		0.00352488	1.24247E-05	5.52211029		
25	0.00092 mol		0.002907801 mol		0.0019878	3.95135E-06	4.66842448		
26									
27			Summe der gewichteten Quadrate der Differenzen:				17.7872521		

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. Auch hier ist wieder sinnvoll, Namen zu zu ordnen.

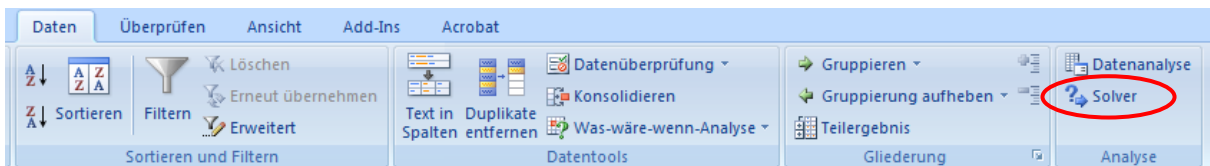
Nun berechnen wir die adsorbierte Menge nach der Gleichung

$$a = \frac{A * c}{B + c} :$$

Aus den beiden Werten, der experimentell bestimmten und der berechneten Absorption, werden nun die Differenzen gebildet und diese wiederum quadriert. Anschließend werden die gewichteten Differenzen (hier werden die relativen Fehler berechnet) der Quadrate gebildet.

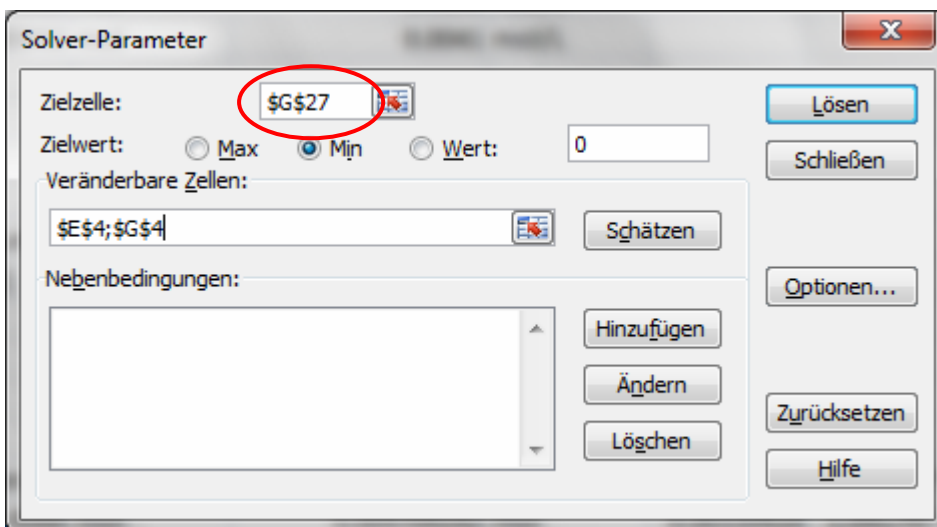
(siehe Gleichung in Zelle G20)

Nun wird die Summe der gewichteten Differenzen der Quadrate berechnet und durch die Anzahl der Werte geteilt. Dies ist nun der Ausgangswert, den der Solver minimieren soll.



Starten sie den Solver (unter dem Menüpunkt Daten):

Zielzelle ist die eben berechnete Summe. *Veränderbare Zellen* sind in diesem Fall die Werte für A und B (E4 und G4). Über die Option *Nebenbedingungen* können sie noch Einschränkungen vornehmen (z.B. keine negativen Zahlen o.ä.). Wenn sie nun alles



Arbeiten mit Excel

eingestellt haben, können sie den Solver starten. Excel verändert nun ständig die Werte von A und B und sucht ein Minimum für die eben berechnete Summe.

Die fertige Tabelle sollte dann so ähnlich aussehen:

G27		=SUMME(G20:G25)						
	A	B	C	D	E	F	G	H
1	Adsorption von Hac an Aktivkohle							
2	Adsorbierte Menge		Konz		Konstanten			
3	0.0064 mol		0.328 mol/L		A		B	
4	0.00425 mol		0.1535 mol/L		0.00526634 mol		0.02400755 mol/L	
5	0.00372 mol		0.062 mol/L					
6	0.00239 mol		0.0264 mol/L					
7	0.0015 mol		0.0101 mol/L					
8	0.00092 mol		0.0041 mol/L					
9								
10								
11								
12								
13	Gleichung für Langmuir							
14	$a = A * c / (B + c)$							
15								
16								
17								
18								
19	Adsorbierte Menge - exp		Adsorbierte Menge - berechnet		Differenz	Differenz^2	gew. Diff^2	
20	0.0064 mol		0.004907166 mol		-0.00149283	2.22855E-06	0.05440805	
21	0.00425 mol		0.004554078 mol		0.00030408	9.24631E-08	0.00511907	
22	0.00372 mol		0.00379633 mol		7.633E-05	5.8263E-09	0.00042102	
23	0.00239 mol		0.002758146 mol		0.00036815	1.35531E-07	0.02372705	
24	0.0015 mol		0.00155948 mol		5.948E-05	3.53783E-09	0.00157237	
25	0.00092 mol		0.000768192 mol		-0.00015181	2.30457E-08	0.0272279	
26								
27	Summe der gewichteten Quadrate der Differenzen:						0.11247546	

Nun kann noch gewählt werden, ob man das Ergebnis beibehalten will oder zu den Ausgangswerten zurückkehren will. Erst durch diese Bestätigung ist der Lösungsvorgang abgeschlossen.

