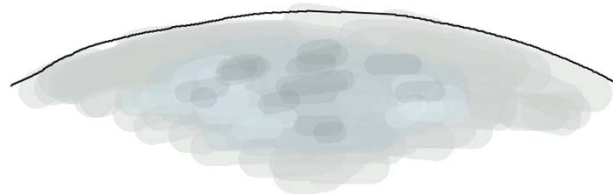


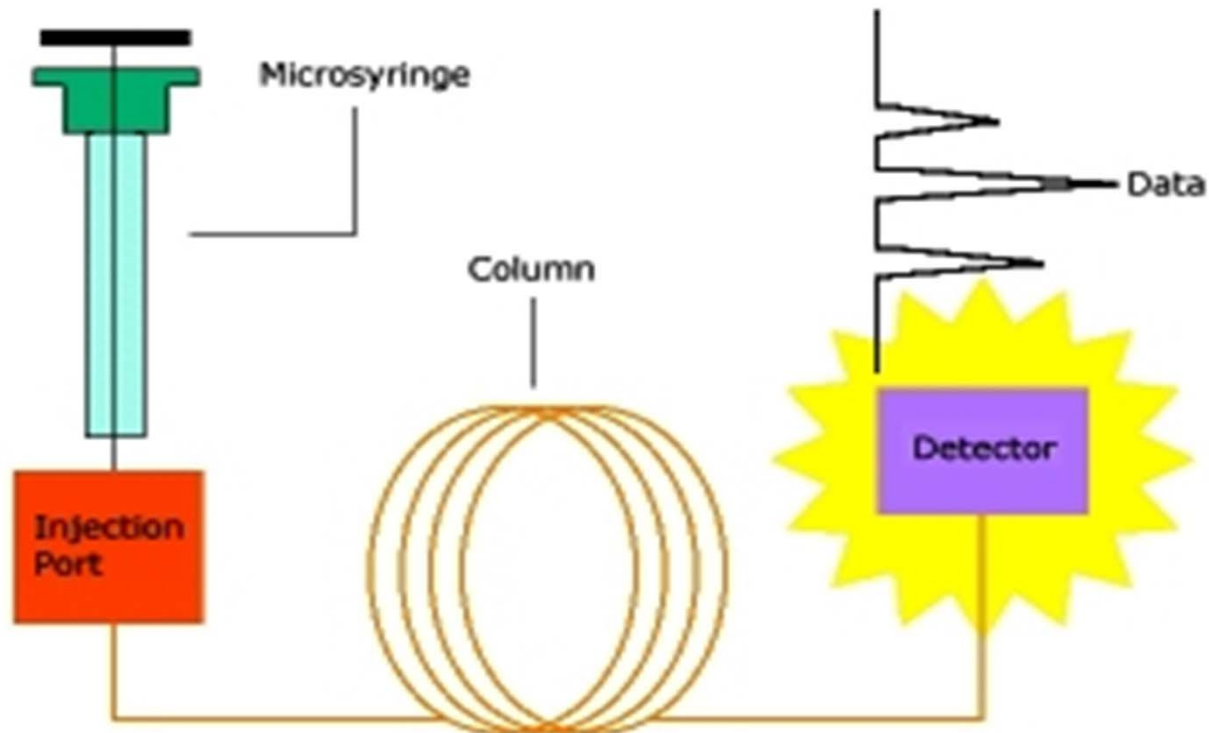
엑셀 예제들:  
van Deemter equation  
Heat capacity



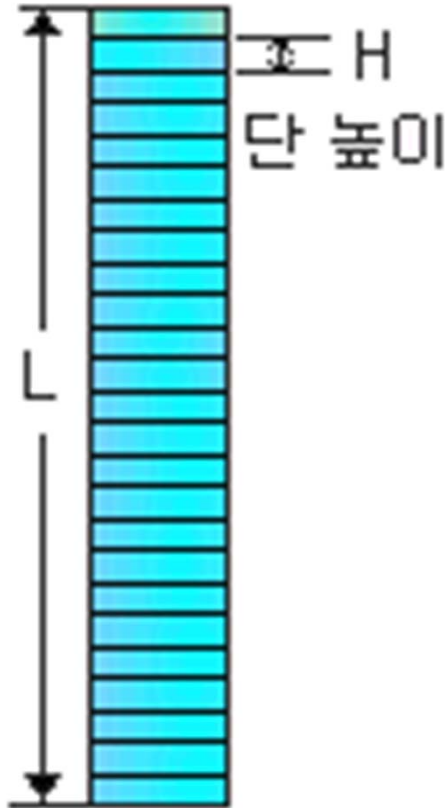
# Gas Chromatography

1906년 M. Tswett는 흡착제를 충전시킨 Glass Column(유리분리관)을 사용하여 식물의 색소물질을 분리하였으며, 이 과정을color-writing(색 기록)이라는 의미로 chromatography(크로마토그래피)라고 명명하였다.

기체 크로마토그래피는 크로마토그래피의 일종으로 기체 이동상(移動相)과 액체나 고체 고정상(固定相) 사이에서 화학적 혼합기체를 분배에 의해 분리한다.



# van Deemter equation



단 이론이란 컬럼내에 단(theoretical plate)이 연속으로 연결되어 있고 각각의 단에서 분배평형이 일어나 물질이 분리되며, 이론단의 수가 많을수록 컬럼 효율이 높다는 이론이다.

즉, Van deemter equation ( $HETP = A + B/u + Cu = A + B/u + (C_s + C_m)u$ )는 크로마토그래피의 컬럼이 최대 효율을 나타낼 때의 유속을 구하는 식입니다.

# 예제

기체 크로마토그래피(Gas chromatography)에서 사용되는 Van Deemter 방정식은 유속 (flow rate, ml/min)에 대한 단 높이(plate height, mm)의 값을 정해준다. Van Deemter 방정식은 다음과 같이 나타낸다.

$$y = Ax + B/x + C$$

여기서  $y$ 는 단 높이,  $x$ 는 유속이고  $A$ ,  $B$ , 그리고  $C$ 는 지정해야 할 상수이다. 다음과 같은 데이터가 있을 때 상수  $A$ ,  $B$ , 그리고  $C$ 의 값을 결정하시오.



# 예제 자료

Flow rate (ml/min)	Plate height (mm)
3.4	9.59
7.1	5.29
16.1	3.63
20.0	3.42
23.1	3.46
34.4	3.06
40.0	3.25
44.7	3.31
65.9	3.50
78.9	3.86
95.8	4.24
115.4	4.62
120.0	4.67

















Book1 - Mi

홈 삽입 페이지 레이아웃 수식 데이터 검토 보기

잘라내기 붙여넣기 클립보드

맑은 고딕 11


텍스트 줄 바꿈 병합하고 가운데 맞춤

일반 W % .00 .00 표시 형식

표준 계산 조건부 서식 표 서식

E9 fx = \$I\$7\*C9+\$I\$8/C9+\$I\$9

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1										
2										
3										
4			Nonlinear Least Squares curve fitting of van deemter Equation							
5										
6			y=Ax+B/x+C							
7									A	1
8			x	y	y(cal)	(y-y(cal))^2			B	2
9			3.4	9.59	6.988235	6.769179585			C	3
10			7.1	5.29						
11			16.1	3.63						
12			20	3.42						
13			23.1	3.46						
14			34.4	3.06						
15			40	3.25						
16			44.7	3.31						
17			65.9	3.5						
18			78.9	3.86						
19			95.8	4.24						
20			115.4	4.62						
21			120	4.67						
22										
23										
24										











기본 설정

수식

언어 교정

저장

고급

사용자 지정

추가 기능

보안 센터

리소스



Microsoft Office 추가 기능을 보고 관리합니다.

## 추가 기능

이름	위치	종류
활성 응용 프로그램 추가 기능		
Send to Bluetooth	C:\#...es (x86)\#Intel\Bluetooth\#btmoffice.dll	COM 추가 기능
분석 도구	C:\#...e12\Library\#Analysis\#ANALYS32.XLL	Excel 추가 기능
분석 도구 - VBA	C:\#...ce12\Library\#Analysis\#atpvbaen.xlam	Excel 추가 기능
해 찾기 추가 기능	C:\#...ffice12\Library\#SOLVER\#solver.xlam	Excel 추가 기능
비활성 응용 프로그램 추가 기능		
날짜 (영어 스마트 태그 목록)	C:\#...icrosoft shared\#Smart Tag\#MOFL.DLL	스마트 태그
날짜 (한국어 날짜 인식자)	C:\#...soft shared\#Smart Tag\#KSTRECOG.DLL	스마트 태그
레이블 인쇄 마법사	C:\#...2\Library\#Label Print\#labelprint.xlam	Excel 추가 기능
머리글/바닥글	C:\#...icrosoft Office\Office12\#OFFRHD.DLL	문서 검사
보이지 않는 내용	C:\#...icrosoft Office\Office12\#OFFRHD.DLL	문서 검사
사람 이름 (Outlook 전자 메일 받는 사람)	C:\#...icrosoft shared\#Smart Tag\#FNAME.DLL	스마트 태그
사람 이름 (한국어 사람 이름 인식자)	C:\#...soft shared\#Smart Tag\#KSTRECOG.DLL	스마트 태그
사용자 지정 XML 데이터	C:\#...icrosoft Office\Office12\#OFFRHD.DLL	문서 검사
숨겨진 워크시트	C:\#...icrosoft Office\Office12\#OFFRHD.DLL	문서 검사
숨겨진 행 및 열	C:\#...icrosoft Office\Office12\#OFFRHD.DLL	문서 검사
시간 (한국어 시간 인식자)	C:\#...soft shared\#Smart Tag\#KSTRECOG.DLL	스마트 태그
유로화 도구	eurotool.xlam	Excel 추가 기능

추가 기능: 해 찾기 추가 기능

게시자:

위치: C:\#Program Files (x86)\#Microsoft Office\Office12\Library\#SOLVER\#solver.xlam

설명: 최적화와 방정식의 해를 구하는 방법을 제공합니다.

관리: Excel 추가 기능

이동(G)...

확인

취소

Book1 - Mi

홈 삽입 페이지 레이아웃 수식 데이터 검토 보기

Access 웹 텍스트 기타 기존 연결 외부 데이터 가져오기

모두 새로 고침 연결 편집 연결

정렬 정렬 필터 지우기 다시 적용 고급

텍스트 나누기 중복된 항목 제거 유효성 검사 통합 가상 분석 데이터 도구

F23      fx      =SUM(F9:F21)

해 찾기 모델 설정

목표 셀(E): 3\$F\$23      실행(S)

해의 조건:     최대값(M)     최소값(N)     지정값(V): 0      닫기

값을 바꿀 셀(B): \$1\$8:\$1\$10      추정(G)      옵션(O)...

제한 조건(U):

추가(A)...      초기화(R)

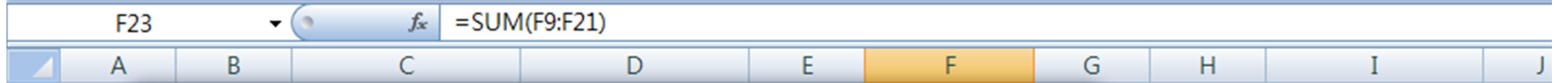
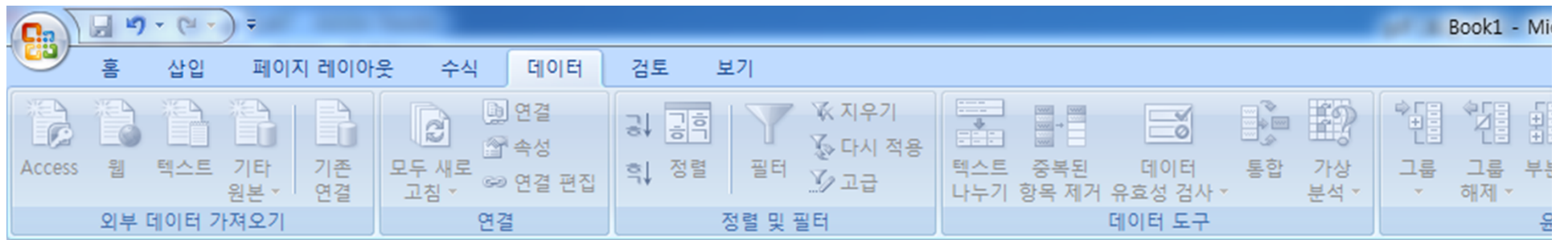
변경(C)...      도움말(H)

삭제(D)

A	1
B	2
C	3

15	40	3.25	43.05	1584.04
16	44.7	3.31	47.74474	1974.446361
17	65.9	3.5	68.93035	4281.130572
18	78.9	3.86	81.92535	6094.198643
19	95.8	4.24	98.82088	8945.542261
20	115.4	4.62	118.4173	12949.83255
21	120	4.67	123.0167	14005.93351
22				
23				52198.03004
24				

목표 셀



해 찾기 모델 설정

목표 셀(E):  실행(S)

해의 조건:  최대값(M)  최소값(N)  지정값(V):  닫기

값을 바꿀 셀(B):  추정(G) 옵션(O)...

제한 조건(U)

초기화(R)

도움말(H)

A	1
B	2
C	3

변수 셀

15		40	3.25	43.05	1584.04
16		44.7	3.31	47.74474	1974.446361
17		65.9	3.5	68.93035	4281.130572
18		78.9	3.86	81.92535	6094.198643
19		95.8	4.24	98.82088	8945.542261
20		115.4	4.62	118.4173	12949.83255
21		120	4.67	123.0167	14005.93351
22					
23					52198.03004
24					

Book1 - Mi

홈 삽입 페이지 레이아웃 수식 데이터 검토 보기

Access 웹 텍스트 기타 기존 연결  
외부 데이터 가져오기

모두 새로 고침 연결 편집  
연결

정렬 필터 지우기 다시 적용  
정렬 및 필터

텍스트 나누기 중복된 항목 제거 유효성 검사  
데이터 도구

통합 가상 분석  
그룹 해제

F23

=SUM(F9:F21)

해 찾기 옵션

최대 계산 시간(T): 100 초

최대 계산 횟수(I): 100

정밀도(P): 0,000001

허용 한도(E): 5 %

수렴도(V): 0,0001

선형 모델 가정(M)       단위 자동 설정(U)  
 음수 아닌 것으로 가정(G)       중간 결과 보기(B)

근사 방법      미분 계수      탐색 방법

1차식(A)       전진(F)       뉴턴법(N)  
 2차식(Q)       중앙(C)       공역 경사법(O)

확인  
취소  
모델 읽기(L)...  
모델 저장(S)...  
도움말(H)

A	1
B	2
C	3

44.7	3.31	47.74474	1974.446361
65.9	3.5	68.93035	4281.130572
78.9	3.86	81.92535	6094.198643
95.8	4.24	98.82088	8945.542261
115.4	4.62	118.4173	12949.83255
120	4.67	123.0167	14005.93351

52198.03004



Book1 - Mi

홈 삽입 페이지 레이아웃 수식 데이터 검토 보기

외부 데이터 가져오기 | 연결 | 정렬 및 필터 | 데이터 도구

F23

=SUM(F9:F21)

해 찾기 옵션

최대 계산 시간(T): 100 초

최대 계산 횟수(I): 100

정밀도(P): 0,0001

허용 한도(E): 5 %

수렴도(V): 0,0001

선형 모델 가정(M)       단위 자동 설정(U)  
 음수 아닌 것으로 가정(G)       중간 결과 보기(B)

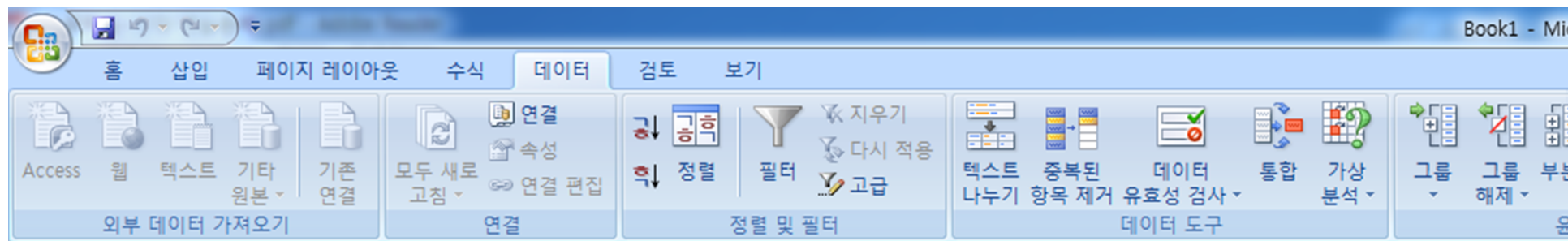
근사 방법      미분 계수      탐색 방법

1차식(A)       전진(F)       뉴턴법(N)  
 2차식(Q)       중앙(C)       공역 경사법(O)

확인    취소    모델 읽기(L)...    모델 저장(S)...    도움말(H)

A	1
B	2
C	3

16	44.7	3.31	47.74474	1974.446361
17	65.9	3.5	68.93035	4281.130572
18	78.9	3.86	81.92535	6094.198643
19	95.8	4.24	98.82088	8945.542261
20	115.4	4.62	118.4173	12949.83255
21	120	4.67	123.0167	14005.93351
22				
23				52198.03004
24				



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1										
2										
3										
4										
5										
6										
7										
8										
9										
10										
11										
12			20	3.42	3.391675	0.000802284				
13			23.1	3.46	3.287981	0.029590669				
14			34.4	3.06	3.183687	0.015298463				
15			40	3.25	3.211593	0.001475134				
16			44.7	3.31	3.256052	0.00291034				
17			65.9	3.5	3.581162	0.006587217				
18			78.9	3.86	3.831656	0.000803372				
19			95.8	4.24	4.184416	0.003089526				
20			115.4	4.62	4.615459	2.06209E-05				
21			120	4.67	4.718865	0.002387794				
22										
23										0.115444964
24										

해 찾기 결과

모든 제한 조건을 만족시키는 해에 수렴했습니다.

보고서(R):

구한 해로 바꾸기(K)

초기값 유지(O)

확인    취소    시나리오 저장(S)...    도움말(H)

A	0.024409917
B	26.73124785
C	1.566914662



Excel ribbon menu: Home, Insert, Page Layout, Formulas, Data, Review, View, Developer Tools, Add-ins

Clipboard, Font, Paragraph, Styles, Cells, Editing, Calculation, Name Manager, Solver, Data Tools, Filter, Find & Select

TTEST     $\times$   $\checkmark$   $f_x$     =linest(E9:E21,C9:D21,True)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
4			Nonlinear Least Squares curve fitting of van deemter Equation							
5										
6			y=Ax+B/x+C							
7										
8			x	1/x	y		B	A	C	
9			3.4	0.294117647	9.59		=linest(E9:E21,C9:D21,True)			
10			7.1	0.14084507	5.29					
11			16.1	0.062111801	3.63					
12			20	0.05	3.42					
13			23.1	0.043290043	3.46					
14			34.4	0.029069767	3.06					
15			40	0.025	3.25					
16			44.7	0.022371365	3.31					
17			65.9	0.015174507	3.5					
18			78.9	0.012674271	3.86					
19			95.8	0.010438413	4.24					
20			115.4	0.008665511	4.62					
21			120	0.008333333	4.67					
22										
23										
24										

배열함수:Ctrl+Shift+Enter





홈 삽입 페이지 레이아웃 수식 데이터 검토 보기 개발 도구 추가 기능

맑은 고딕 11 가 가

가 가 가

글꼴 맞춤 표시 형식 스타일 셀 편집

조건부 서식 표 서식 셀 스타일 삽입 삭제 서식 정렬 및 필터 찾기 및 선택

G9 fx {=LINEST(E9:E21,C9:D21,TRUE)}

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
4			Nonlinear Least Squares curve fitting of van deemter Equation							
5										
6			y=Ax+B/x+C							
7										
8			x	1/x	y		B	A	C	
9			3.4	0.294117647	9.59		26.73133	0.02441	1.566900601	
10			7.1	0.14084507	5.29					
11			16.1	0.062111801	3.63					
12			20	0.05	3.42					
13			23.1	0.043290043	3.46					
14			34.4	0.029069767	3.06					
15			40	0.025	3.25					
16			44.7	0.022371365	3.31					
17			65.9	0.015174507	3.5					
18			78.9	0.012674271	3.86					
19			95.8	0.010438413	4.24					
20			115.4	0.008665511	4.62					
21			120	0.008333333	4.67					
22										
23										
24										

준비 Sheet1 Sheet2 Sheet3 평균: 9.440880502 개수: 3 합계: 28.32264151 100%

# Heat capacity

어떤 물질의 온도를 1°C 또는 1K 높이는데 필요한 열량으로 열을 가하거나 빼앗을 때 물체의 온도가 얼마나 쉽게 변하는지를 알려주는 값이다.

$$C \text{ (cal/}^\circ\text{C or J/K)} = Q/\Delta T$$

단위 질량에 대한 열용량은 비열이라고 한다.

$$mc=C \text{ (c=specific heat)}$$

엔탈피는  $\Delta H = \Delta Q + V\Delta P$  로 정의된다. 그러므로 압력이 일정할 때 엔탈피 변화량은  $\Delta H = \Delta Q = mc\Delta T$  이다.

# 예제

$$\Delta H = mc\Delta T$$

즉  $\Delta H$  는 알고자 하는 열의 양이며,  $m$ 은 물체의 질량 ( $g$ )이고,  $c$ 는 열용량( $\text{cal}/(\text{g}^\circ\text{C})$ )이고,  $\Delta T$ 는 온도( $^\circ\text{C}$ )의 변화이다. 열용량이 고정된 상수라면 위의 식은 단순한 계산으로 열의 양을 알 수 있다. 하지만 매우 넓은 범위의 온도에 대해서 열용량은 온도에 대한 함수이다.

즉,  $c(T) = A + BT + CT^2$  혹은  $T$ 에  $n$ 차의 다항식(polynomial)의 형태로 나타낸다.

# 예제

$$\bar{c}(T) = \frac{\int_{T_1}^{T_2} c(T) dT}{T_2 - T_1}$$

이식은 처음의 열 계산에 필요한 열용량으로 대입된다. 대입을 하면 다음과 같다.

$$\Delta H = m \int_{T_1}^{T_2} c(T) dT$$

열용량과 온도에 대한 데이터가 다음과 같을 때 열용량을 온도의 함수로 나타내고  $-100^{\circ}\text{C}$ 에서  $200^{\circ}\text{C}$ 까지  $1000\text{g}$ 의 물체의 온도를 높이기 위한 열용량을 계산하시오.



# 예제

$T$ (°C)	$c$ (cal/(g °C))
-100	0.11904
-50	0.12486
0	0.13200
50	0.14046
100	0.15024
150	0.16134
200	0.17376

































Book1 - Mi

홈 삽입 페이지 레이아웃 수식 데이터 검토 보기

외부 데이터 가져오기 | 연결 | 정렬 및 필터 | 데이터 도구

G13    fx    =SUM(G5:G11)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1													
2			c(t) = A+BT+CT <sup>2</sup>										
3													
4			T	T <sup>2</sup>	c	c(cal)	(c-c(cal))^2		A	B	C		
5			-100	10000	0.11904	9901	98027443.78		1	1	1		
6			-50	2500	0.12486	2451	6006788.952						
7			0	0	0.132	1	0.753424						
8			50	2500	0.14046	2551	6506884.393						
9			100	10000	0.15024	10101	102027165.9						
10			150	22500	0.16134	22651	513060492						
11			200	40000	0.17376	40201	1616106430						
12													
13						sum	2341735206						
14													
15													
16													
17													
18													
19													
20													
21													
22													
23													

해 찾기 모델 설정

목표 셀(E):    \$G\$13

해의 조건:     최대값(M)     최소값(M)

값을 바꿀 셀(B):

제한 조건(L):







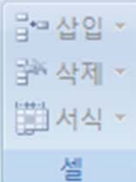
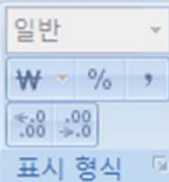
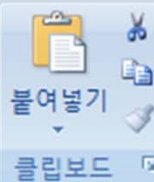








홈 삽입 페이지 레이아웃 수식 데이터 검토 보기 개발 도구 추가 기능



TTEST  $\times$   $\checkmark$   $f_x$  =LINEST(E5:E11,C5:D11,True)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1												
2			c(t) = A+BT+CT <sup>2</sup>									
3												
4			T	T <sup>2</sup>	c		C	B	A			
5			-100	10000	0.11904		=LINEST(E5:E11,C5:D11,True)					
6			-50	2500	0.12486							
7			0	0	0.132		c(t) = 0.132+0.000159T+2.42E-07T <sup>2</sup>					
8			50	2500	0.14046							
9			100	10000	0.15024							
10			150	22500	0.16134							
11			200	40000	0.17376							
12												
13												
14												
15												
16												
17												
18												
19												
20												
21												

배열함수: Ctrl+Shift+Enter



붙여넣기, 클립보드, 글꼴, 맞춤, 일반, 조건부 서식, 표 서식, 셀 서식, 삽입, 삭제, 서식, 정렬 및 필터, 찾기 및 선택, 편집

G11

fx

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1												
2			c(t) = A+BT+CT <sup>2</sup>									
3												
4			T	T <sup>2</sup>	c		C	B	A			
5			-100	10000	0.11904		0.000000264	0.000156	0.132			
6			-50	2500	0.12486							
7			0	0	0.132		c(t) = 0.132+0.000159T+2.42E-07T <sup>2</sup>					
8			50	2500	0.14046							
9			100	10000	0.15024							
10			150	22500	0.16134							
11			200	40000	0.17376							
12												
13												
14												
15												
16												
17												
18												
19												
20												
21												

# Summary

- LINEST 함수:데이터에 가장 적합한 직선을 구하는 "최소 자승법"을 사용하여 선의 통계를 계산하고 선에 대한 배열을 구하는 함수.
- 해찾기 기능:사용자가 지정해 놓은 조건에서 가장 적절한 결과를 오차범위 내에서 반복하여 결과를 얻어내는 기능.
- 해찾기 기능 추가:엑셀 옵션→추가기능 →해찾기 추가기능