

Curve Fitting Demo

*This worksheet demonstrates the curve fitting functions in XLCURVE.DLL.  
All function calls are hi-lighted in magenta color.*

Polynomial Curve Fitting (view Polyde.xlc)

**Change the order below and watch the chart**

**2** Order <= 18

Index	IndVar	DepVar	Yest	Resid		For Order 2
0	2.0	139.78	Err:508	Err:508	Err:508	polynomial coefficients
1	2.1	377.36	Err:508	Err:508	Err:508	
2	2.2	568.24	Err:508	Err:508	Err:508	
3	2.3	728.63	Err:508	Err:508	Err:508	standard errors of coefficients
4	2.4	571.50	Err:508	Err:508	Err:508	
5	2.5	251.65	Err:508	Err:508	Err:508	see
6	2.6	423.04	Err:508	Err:508	Err:508	
7	2.7	646.77	Err:508	Err:508	Err:508	rsqrval
8	2.8	448.87	Err:508	Err:508	Err:508	rval
9	2.9	726.56	Err:508	Err:508	Err:508	cferror
10	3.0	1147.70	Err:508	Err:508	Err:508	empty
11	3.1	1141.48	Err:508	Err:508	Err:508	
12	3.2	1393.73	Err:508	Err:508	Err:508	
13	3.3	1782.79	Err:508	Err:508	Err:508	
14	3.4	1255.23	Err:508	Err:508	Err:508	
15	3.5	550.21	Err:508	Err:508	Err:508	
16	3.6	1164.64	Err:508	Err:508	Err:508	
17	3.7	696.29	Err:508	Err:508	Err:508	
18	3.8	1565.07	Err:508	Err:508	Err:508	
19	3.9	1844.01	Err:508	Err:508	Err:508	

Cubic Splines (view Splinede.xlc)

*Demo function is  $3*\cos(x)$  where  $x$  is from 0 to  $2*\pi$   
X-values of 2.3 and 4.4 are altered*

*SplineX cont  
SplineY cont*

Index	IndVarS	DepVarS	CoefS				
0	0	3	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
1	0.628318531	2.427050983	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
2	1.256637061	0.927050983	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
3	1.884955592	-0.92705098	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
4	2.3	1.5	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508

5	3.141592654	-3	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
6	3.769911184	-2.42705098	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
7	4.4	2	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
8	5.026548246	0.927050983	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
9	5.654866776	2.427050983	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
10	6.283185307	3				
11						
12						
13						
14						
15						
16						
17						
18						
19						
20						
21						
22						
23						
24						
25						
26						
27						
28						
29						
30						
31						
32						
33						
34						
35						
36						
37						
38						
39						
40						
41						
42						
43						
44						
45						
46						
47						
48						

49  
50  
51  
52  
53  
54  
55  
56  
57  
58  
59  
60  
61  
62  
63  
64  
65  
66  
67  
68  
69  
70  
71  
72  
73  
74  
75  
76  
77  
78  
79  
80  
81  
82  
83  
84  
85  
86  
87  
88  
89  
90  
91  
92

93  
94  
95  
96  
97  
98  
99

Index	Data	Smooth SG	Smooth Wts
0	1.083565373	Err:508	Err:508
1	1.03717555	Err:508	Err:508
2	0.397700786	Err:508	Err:508
3	-0.01291682	Err:508	Err:508
4	0.598033051	Err:508	Err:508
5	0.994099241	Err:508	Err:508
6	0.138801898	Err:508	Err:508
7	0.382905303	Err:508	Err:508
8	0.29814673	Err:508	Err:508
9	0.185154126	Err:508	Err:508
10	0.268235087	Err:508	Err:508
11	0.279190489	Err:508	Err:508
12	0.442710942	Err:508	Err:508
13	0.187567983	Err:508	Err:508
14	0.206063366	Err:508	Err:508
15	0.342206033	Err:508	Err:508
16	0.706941085	Err:508	Err:508
17	0.261199346	Err:508	Err:508
18	0.30288097	Err:508	Err:508
19	0.243435787	Err:508	Err:508
20	0.659607314	Err:508	Err:508
21	0.726373489	Err:508	Err:508
22	0.400973029	Err:508	Err:508
23	0.660106693	Err:508	Err:508
24	0.252218084	Err:508	Err:508
25	0.209274402	Err:508	Err:508
26	0.538887735	Err:508	Err:508
27	0.30533402	Err:508	Err:508
28	0.884576748	Err:508	Err:508
29	0.36963714	Err:508	Err:508
30	0.790635003	Err:508	Err:508
31	0.423454941	Err:508	Err:508
32	0.720466968	Err:508	Err:508
33	0.144118354	Err:508	Err:508
34	0.438098814	Err:508	Err:508
35	-0.07001075	Err:508	Err:508
36	0.158017809	Err:508	Err:508

Weights
1
2
3
2
1
<b>9 Divisor</b>

37	0.585567564	Err:508	Err:508
38	0.172777204	Err:508	Err:508
39	1.023060927	Err:508	Err:508
40	-0.05231865	Err:508	Err:508
41	0.615238479	Err:508	Err:508
42	0.099485751	Err:508	Err:508
43	0.992603044	Err:508	Err:508
44	0.521035529	Err:508	Err:508
45	0.645231109	Err:508	Err:508
46	0.548539446	Err:508	Err:508
47	0.801632043	Err:508	Err:508
48	0.211632518	Err:508	Err:508
49	0.672116116	Err:508	Err:508
50	1.082370248	Err:508	Err:508
51	0.204840995	Err:508	Err:508
52	0.633136476	Err:508	Err:508
53	0.17548276	Err:508	Err:508
54	-0.05922672	Err:508	Err:508
55	0.70247694	Err:508	Err:508
56	0.767138893	Err:508	Err:508
57	0.94714173	Err:508	Err:508
58	0.085660021	Err:508	Err:508
59	0.613353529	Err:508	Err:508
60	0.891087829	Err:508	Err:508
61	0.347734161	Err:508	Err:508
62	0.894049691	Err:508	Err:508
63	0.101703383	Err:508	Err:508
64	0.949200857	Err:508	Err:508
65	0.88810544	Err:508	Err:508
66	0.752232968	Err:508	Err:508
67	0.462419114	Err:508	Err:508
68	0.419832178	Err:508	Err:508
69	0.230503886	Err:508	Err:508
70	0.897049835	Err:508	Err:508
71	-0.0102351	Err:508	Err:508
72	0.846082783	Err:508	Err:508
73	0.019261675	Err:508	Err:508
74	0.595744488	Err:508	Err:508
75	0.279727358	Err:508	Err:508
76	1.059538401	Err:508	Err:508
77	0.114010233	Err:508	Err:508
78	0.023986755	Err:508	Err:508
79	0.33385724	Err:508	Err:508
80	0.085088698	Err:508	Err:508

81	1.016765838	Err:508	Err:508
82	0.10670521	Err:508	Err:508
83	0.29766847	Err:508	Err:508
84	0.070558177	Err:508	Err:508
85	0.311077972	Err:508	Err:508
86	0.614431066	Err:508	Err:508
87	0.24252991	Err:508	Err:508
88	0.46571632	Err:508	Err:508
89	0.084382907	Err:508	Err:508
90	0.20718094	Err:508	Err:508
91	0.539718668	Err:508	Err:508
92	0.578263406	Err:508	Err:508
93	0.823404457	Err:508	Err:508
94	0.147011893	Err:508	Err:508
95	0.77322663	Err:508	Err:508
96	0.31721864	Err:508	Err:508
97	0.380302435	Err:508	Err:508
98	0.272426607	Err:508	Err:508
99	0.935993566	Err:508	Err:508

#### Huckel MO Calculations with DIAGONALIZE

Benzene

0	1	0	0	0	1
1	0	1	0	0	0
0	1	0	1	0	0
0	0	1	0	1	0
0	0	0	1	0	1
1	0	0	0	1	0

#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?
#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?
#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?
#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?
#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?
#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?
#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?	#MACRO?

allyl

0	1	1
1	0	1
0	1	0

CycloPropane

0	1	1
1	0	1
1	1	0

Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508

Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508

Butene

0	1	0	0
1	0	1	0
0	1	0	1
0	0	1	1

Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508

Napthlene

0	1	0	0	0	0	0
1	0	1	0	0	0	1
0	1	0	1	0	0	0
0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	0	1	0	1
0	1	0	0	0	1	0
0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0

Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508	Err:508

Frequency Demonstration



Values	Intervals	Frequency
1	2	Err:511
2	5	Err:511
3	9	Err:511
4		Err:511
5		
6		
7		
8		
9		
10		

2
3
3

*ains 100 x-values*  
*ains interpolated Y values for the 100 x-values*

<b>SplineX</b>	<b>SplineY</b>	<b>OriginalY</b>	<b>Diff</b>
0	Err:508	3	Err:508
0.062831853	Err:508		Err:508
0.125663706	Err:508		Err:508
0.188495559	Err:508		Err:508
0.251327412	Err:508		Err:508

0.314159265	Err:508		Err:508
0.376991118	Err:508		Err:508
0.439822972	Err:508		Err:508
0.502654825	Err:508		Err:508
0.565486678	Err:508		Err:508
0.628318531	Err:508	2.427050983	Err:508
0.691150384	Err:508		Err:508
0.753982237	Err:508		Err:508
0.81681409	Err:508		Err:508
0.879645943	Err:508		Err:508
0.942477796	Err:508		Err:508
1.005309649	Err:508		Err:508
1.068141502	Err:508		Err:508
1.130973355	Err:508		Err:508
1.193805208	Err:508		Err:508
1.256637061	Err:508	0.927050983	Err:508
1.319468915	Err:508		Err:508
1.382300768	Err:508		Err:508
1.445132621	Err:508		Err:508
1.507964474	Err:508		Err:508
1.570796327	Err:508		Err:508
1.63362818	Err:508		Err:508
1.696460033	Err:508		Err:508
1.759291886	Err:508		Err:508
1.822123739	Err:508		Err:508
1.884955592	Err:508	-0.92705098	Err:508
1.947787445	Err:508		Err:508
2.010619298	Err:508		Err:508
2.073451151	Err:508		Err:508
2.136283004	Err:508		Err:508
2.199114858	Err:508		Err:508
2.261946711	Err:508		Err:508
2.3	Err:508	1.5	Err:508
2.387610417	Err:508		Err:508
2.45044227	Err:508		Err:508
2.513274123	Err:508		Err:508
2.576105976	Err:508		Err:508
2.638937829	Err:508		Err:508
2.701769682	Err:508		Err:508
2.764601535	Err:508		Err:508
2.827433388	Err:508		Err:508
2.890265241	Err:508		Err:508
2.953097094	Err:508		Err:508
3.015928947	Err:508		Err:508

3.078760801	Err:508		Err:508
3.141592654	Err:508	-3	Err:508
3.204424507	Err:508		Err:508
3.26725636	Err:508		Err:508
3.330088213	Err:508		Err:508
3.392920066	Err:508		Err:508
3.455751919	Err:508		Err:508
3.518583772	Err:508		Err:508
3.581415625	Err:508		Err:508
3.644247478	Err:508		Err:508
3.707079331	Err:508		Err:508
3.769911184	Err:508	-2.42705098	Err:508
3.832743037	Err:508		Err:508
3.89557489	Err:508		Err:508
3.958406744	Err:508		Err:508
4.021238597	Err:508		Err:508
4.08407045	Err:508		Err:508
4.146902303	Err:508		Err:508
4.209734156	Err:508		Err:508
4.272566009	Err:508		Err:508
4.335397862	Err:508		Err:508
4.4	Err:508	2	Err:508
4.461061568	Err:508		Err:508
4.523893421	Err:508		Err:508
4.586725274	Err:508		Err:508
4.649557127	Err:508		Err:508
4.71238898	Err:508		Err:508
4.775220833	Err:508		Err:508
4.838052687	Err:508		Err:508
4.90088454	Err:508		Err:508
4.963716393	Err:508		Err:508
5.026548246	Err:508	0.927050983	Err:508
5.089380099	Err:508		Err:508
5.152211952	Err:508		Err:508
5.215043805	Err:508		Err:508
5.277875658	Err:508		Err:508
5.340707511	Err:508		Err:508
5.403539364	Err:508		Err:508
5.466371217	Err:508		Err:508
5.52920307	Err:508		Err:508
5.592034923	Err:508		Err:508
5.654866776	Err:508	2.427050983	Err:508
5.71769863	Err:508		Err:508
5.780530483	Err:508		Err:508

5.843362336	Err:508	Err:508
5.906194189	Err:508	Err:508
5.969026042	Err:508	Err:508
6.031857895	Err:508	Err:508
6.094689748	Err:508	Err:508
6.157521601	Err:508	Err:508
6.220353454	Err:508	Err:508



2 <b>SmoothNum</b>
0 <b>DerivNum</b>



0	0	1
0	0	0
0	0	0
0	0	0
0	0	0
0	0	0
1	0	0
0	1	0
1	0	1
0	1	0

---

Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508
Err:508	Err:508	Err:508

---