

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	487.36	Err:508	Err:508	Err:508	polynomial coefficients
1	2.1	194.38	Err:508	Err:508	Err:508	
2	2.2	420.94	Err:508	Err:508	Err:508	
3	2.3	274.62	Err:508	Err:508	Err:508	standard errors of coefficients
4	2.4	281.52	Err:508	Err:508	Err:508	
5	2.5	821.64	Err:508	Err:508	Err:508	see
6	2.6	1039.20	Err:508	Err:508	Err:508	
7	2.7	408.64	Err:508	Err:508	Err:508	rsqrval
8	2.8	519.74	Err:508	Err:508	Err:508	rval
9	2.9	933.20	Err:508	Err:508	Err:508	cferror
10	3.0	1080.71	Err:508	Err:508	Err:508	empty
11	3.1	738.58	Err:508	Err:508	Err:508	
12	3.2	449.34	Err:508	Err:508	Err:508	
13	3.3	1250.74	Err:508	Err:508	Err:508	
14	3.4	750.29	Err:508	Err:508	Err:508	
15	3.5	1118.39	Err:508	Err:508	Err:508	
16	3.6	1464.38	Err:508	Err:508	Err:508	
17	3.7	1341.40	Err:508	Err:508	Err:508	
18	3.8	904.81	Err:508	Err:508	Err:508	
19	3.9	1504.45	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	0.72083192	Err:508	Err:508
1	0.446097434	Err:508	Err:508
2	0.230485118	Err:508	Err:508
3	0.33988986	Err:508	Err:508
4	0.875573896	Err:508	Err:508
5	0.170037787	Err:508	Err:508
6	0.880325866	Err:508	Err:508
7	0.844471179	Err:508	Err:508
8	0.704194209	Err:508	Err:508
9	0.891722272	Err:508	Err:508
10	0.165341887	Err:508	Err:508
11	0.730194278	Err:508	Err:508
12	0.888627925	Err:508	Err:508
13	0.821288965	Err:508	Err:508
14	0.436775515	Err:508	Err:508
15	0.421045115	Err:508	Err:508
16	0.495295002	Err:508	Err:508
17	0.510499644	Err:508	Err:508
18	0.903627532	Err:508	Err:508
19	0.773147202	Err:508	Err:508
20	0.987813926	Err:508	Err:508
21	0.039782463	Err:508	Err:508
22	0.063488742	Err:508	Err:508
23	0.873311073	Err:508	Err:508
24	0.97609329	Err:508	Err:508
25	0.760255475	Err:508	Err:508
26	0.483120028	Err:508	Err:508
27	0.867045493	Err:508	Err:508
28	0.011704763	Err:508	Err:508
29	0.210360626	Err:508	Err:508
30	0.836940379	Err:508	Err:508
31	0.493670765	Err:508	Err:508
32	0.995043528	Err:508	Err:508
33	0.124148159	Err:508	Err:508
34	0.507488456	Err:508	Err:508
35	-0.08877485	Err:508	Err:508
36	0.976538195	Err:508	Err:508

Weights
1
2
3
2
1
9 Divisor

37	0.813117512	Err:508	Err:508
38	0.751213518	Err:508	Err:508
39	1.019139774	Err:508	Err:508
40	0.381482153	Err:508	Err:508
41	0.329499593	Err:508	Err:508
42	0.211845305	Err:508	Err:508
43	0.627799998	Err:508	Err:508
44	0.437012571	Err:508	Err:508
45	0.683252627	Err:508	Err:508
46	0.100636167	Err:508	Err:508
47	0.102916985	Err:508	Err:508
48	0.721792521	Err:508	Err:508
49	0.375522995	Err:508	Err:508
50	0.953103811	Err:508	Err:508
51	0.596305149	Err:508	Err:508
52	0.42516022	Err:508	Err:508
53	0.508077907	Err:508	Err:508
54	0.083866083	Err:508	Err:508
55	0.265674778	Err:508	Err:508
56	0.366617846	Err:508	Err:508
57	0.928480042	Err:508	Err:508
58	0.219754765	Err:508	Err:508
59	0.898935414	Err:508	Err:508
60	0.558371392	Err:508	Err:508
61	0.904100366	Err:508	Err:508
62	0.621780985	Err:508	Err:508
63	1.002362809	Err:508	Err:508
64	0.421966542	Err:508	Err:508
65	0.523693531	Err:508	Err:508
66	0.131422525	Err:508	Err:508
67	0.253390162	Err:508	Err:508
68	0.070638607	Err:508	Err:508
69	0.507716682	Err:508	Err:508
70	0.516441255	Err:508	Err:508
71	0.837550898	Err:508	Err:508
72	0.182799953	Err:508	Err:508
73	0.71834422	Err:508	Err:508
74	0.784467002	Err:508	Err:508
75	0.637881813	Err:508	Err:508
76	0.737604001	Err:508	Err:508
77	0.565689626	Err:508	Err:508
78	0.795326262	Err:508	Err:508
79	-0.07135506	Err:508	Err:508
80	0.574437231	Err:508	Err:508

81	0.658025367	Err:508	Err:508
82	0.170037498	Err:508	Err:508
83	0.354294264	Err:508	Err:508
84	0.347344718	Err:508	Err:508
85	0.222538154	Err:508	Err:508
86	0.148708253	Err:508	Err:508
87	0.322173448	Err:508	Err:508
88	0.220736051	Err:508	Err:508
89	0.737401264	Err:508	Err:508
90	0.826091698	Err:508	Err:508
91	0.717967275	Err:508	Err:508
92	0.213638781	Err:508	Err:508
93	0.548402965	Err:508	Err:508
94	0.766255846	Err:508	Err:508
95	0.722793838	Err:508	Err:508
96	0.101690685	Err:508	Err:508
97	0.115576608	Err:508	Err:508
98	0.478808401	Err:508	Err:508
99	0.174034451	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

<i>ains 100 x-values</i> <i>ains interpolated Y values for the 100 x-values</i>
--

SplineX	SplineY	OriginalY	Diff
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 SmoothNum
0 DerivNum



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
