МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ МЕТОДИ

УДК 519.65

О. В. Бісікало [1], Р. Н. Квєтний [1], О. В. Кудрик [1], Ю. А. Олексій [2]

ЗАСТОСУВАННЯ ІНТЕРПОЛЯЦІЇ КУБІЧНИМИ СПЛАЙНАМИ В ІНТЕЛЕКТУАЛЬНІЙ ІНФОРМАЦІЙНІЙ СИСТЕМІ ПРОГНОЗУВАННЯ ФАЗОВОЇ СТАБІЛЬНОСТІ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ

[1] Вінницький національний технічний університет, Вінниця

[2] Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця

Анотація. Дана дослідницька робота присвячена застосуванню інтерполяції кубічними сплайнами для розв’язання актуальної задачі прогнозування фазової стабільності твердих розчинів. Для розрахунку енергій змішування (параметрів взаємодії) та критичних температур розкладання (температур стабільності) твердих розчинів було використано теорію ізоморфних заміщень у кристалах Урусова. Запропонована інтелектуальна інформаційна система (ІІС) автоматизує побудову діаграм, що дає змогу прогнозувати термодинамічну стійкість твердих розчинів. ІІС також надає інтерактивні функції для зручності користувачів. Отримані результати можуть бути корисними при виборі співвідношення компонентів у «змішаних» матрицях, кількості активатора в люмінесцентних, лазерних та інших практично важливих матеріалах, а також у матрицях для іммобілізації токсичних і радіоактивних відходів. При цьому результати застосування інтерполяції на великих відрізках, тобто з відносно великою кількістю вузлових точок, часто виходять незадовільними. З одного боку, при великих відстанях між вузловими точками знижується точність інтерполяції, а, з іншого боку, зі збільшенням кількості вузлових точок через вплив багаточленів високих порядків виникають осциляції інтерполяційної кривої, оскільки тільки таким чином криву можна змусити пройти через задані точки. Такий стан не відповідає реальній залежності, що випливає з табличних значень вузлових точок. Тому запропоновано застосувати сплайн інтерполяцію, яка має низку важливих переваг. По-перше, це висока збіжність. На відміну від інтерполяційних поліномів Лагранжа послідовність кубічних сплайнів на рівномірній сітці вузлів завжди сходиться до безперервної функції, що інтерполюється. По-друге, маємо мінімальну чутливість до похибки вихідних даних. Невеликі зміни значень функції в одній або кількох сусідніх точках інтерполяції не позначається дуже істотно на поведінці сплайну на деякому віддаленні від цих точок. Як наслідок вище сказаного – більш висока точність інтерполяції. В результаті дослідження формалізовано розрахунок невідомих коефіцієнтів для запропонованих сплайнів та визначено переваги практичного застосування запропонованого методу інтерполяції. Проведено вдосконалення ІІС фазової стабільності твердих розчинів з використанням інтерполяції кубічними сплайнами, як наслідок – було підвищено точність результатів на 4,96%.

Ключові слова: інтелектуальна інформаційна система, тверді розчини, математичне моделювання, інтерполяція, сплайни.

Abstract. This research work is devoted to the use of cubic spline interpolation to solve the current problem of predicting the phase stability of solid solutions. The theory of isomorphic substitutions in Urusov crystals was used to calculate the mixing energies (interaction parameters) and critical decomposition temperatures (stability temperatures) of solid solutions. The proposed intelligent information system (IIS) automates the construction of diagrams, which allows to predict the thermodynamic stability of solid solutions. IIS also provides interactive features for user convenience. The obtained results can be useful in choosing the ratio of components in "mixed" matrices, the amount of activator in luminescent, laser and other practically important materials, as well as in matrices for immobilization of toxic and radioactive waste. The results of the application of interpolation on large segments, ie with a relatively large number of nodes, are often unsatisfactory. On the one hand, at large distances between nodes the interpolation accuracy decreases, and on the other hand, with increasing number of nodes due to the influence of high-order polynomials there are oscillations of the interpolation curve, because only in this way the curve can be forced to pass through given points. This state does not correspond to the real dependence resulting from the tabular values of the nodes. Therefore, it is proposed to use spline interpolation, which has a number of important advantages. First, it is high convergence. In contrast to Lagrange interpolation polynomials, the sequence of cubic splines on a uniform grid of nodes always converges to a continuous interpolated function. Secondly, we have minimal sensitivity to the error of the original data. Small changes in the values of the function at one or more adjacent interpolation points do not significantly affect the behavior of the spline at some distance from these points. As a consequence of the above - higher interpolation accuracy. As a result of the research the calculation of unknown coefficients for the proposed splines is formalized and the advantages of practical application of the proposed interpolation method are determined. The IIS of phase stability of solid solutions was improved using interpolation by cubic splines, as a result, the accuracy of the results was increased by 4.96%.

Key words: intelligent information system, solid solutions, mathematical modeling, interpolation, splines.

DOI: https://doi.org/10.31649/1999-9941-2022-54-2-94-102.

Вступ

При поданні табличних даних функціональними або графічними залежностями використовують два основних підходи [1]. При одному з них потрібно, щоб апроксимуюча крива (кусково-гладка) проходила через усі точки, задані таблицею. Це вдається зробити за допомогою методів інтерполяції, причому найчастіше використовують інтерполяційні багаточлени, що подаються у формах Лагранжа або Ньютона [2]. За іншого підходу дані апроксимують простою функцією, яка застосовується у всьому діапазоні табличних даних, але необов'язково проходить через усі точки. Такий підхід називають підгонкою кривої, яку прагнуть провести так, щоб її відхилення від табличних даних були мінімальними. Зазвичай прагнуть звести до мінімуму суму квадратів різниць між значеннями функції, визначеними обраною кривою та відповідними даними таблиці. Такий метод підгонки називають методом найменших квадратів. Той та інший підхід мають свої переваги та недоліки.

Щодо методу найменших квадратів, то тут найбільша складність виникає при виборі відповідних апроксимуючих функцій. Цей вибір має здійснюватися з урахуванням специфіки табличних даних, під якою розуміється їх періодичність, ступеневий, експоненційний або логарифмічний характер, властивості симетрії, наявність асимптотики. Якщо табличні дані відповідають якійсь закономірності і добре описуються, наприклад, лінійною або параболічною залежністю, то даний метод дає хороші результати, в іншому випадку можуть виникнути серйозні розбіжності між табличними даними та даними, отриманими на основі апроксимуючою кривою.

При використанні інтерполяції на великих відрізках, тобто з відносно великою кількістю вузлових точок, її результати часто виходять незадовільними. З одного боку, при великих відстані між вузловими точками знижується точність інтерполяції, а, з іншого боку, зі збільшенням кількості вузлових точок через вплив багаточленів високих порядків виникають осциляції інтерполяційної кривої, оскільки тільки таким чином криву можна змусити пройти через задані точки. Зрозуміло, це ніяк не відповідає реальній залежності, що випливає з табличних значень вузлових точок. Виходом із становища може бути кускова інтерполяція нижчого порядку, тобто у цьому випадку інтерполяція здійснюється за невеликою кількістю вузлових точок відрізка, а потім багаточлени об'єднують у загальну інтерполяційну функцію. Проте при цьому в точках стикування зазвичай терпить розрив перша похідна, що також призводить до помилок інтерполяції.

Значною мірою вільним від перерахованих вище недоліків є сплайн-інтерполяція, яка відносно недавно стала використовуватись у обчислювальній математиці [1]. Свою назву (у перекладі з англійської «spline» − пружна лінійка) даний метод отримав тому, що форма розрахункової інтерполяційної кривої збігається з профілем пружної лінійки, яку необхідно певним чином зігнути, щоб вона проходила через вузлові точки. Під сплайном розуміють сукупність пов'язаних інтерполяційних поліномів, що описують кусково-гладку криву, що проходить через вузлові точки, причому в місцях сполучення перша та друга похідна безперервні. Зазвичай обмежуються поліномом третього ступеня, тобто кубічним сплайном.

Мета

Метою статті є підвищення точності результатів інтелектуальної інформаційної системи прогнозування фазової стабільності твердих розчинів за рахунок застосування в ній можливостей інтерполяції кубічними сплайнами.

Порівняння та розв’язання задачі

Порівняно з іншими інтерполяційними методами сплайн інтерполяція має низку важливих переваг [3]. По-перше, це гарна збіжність. На відміну від інтерполяційних поліномів Лагранжа послідовність кубічних сплайнів на рівномірній сітці вузлів завжди сходиться до безперервної функції, що інтерполюється [4]. По-друге, мінімальна чутливість до похибки вихідних даних. Невеликі зміни значень функції в одній або кількох сусідніх точках інтерполяції не позначається дуже істотно на поведінці сплайну на деякому віддаленні від цих точок. Як наслідок вище сказаного – більш висока точність інтерполяції.

Суть методу кубічної сплайн-інтерполяції полягає в наступному (1). Нехай є (i + 1) вузлових точок (x, y), що розбивають деякий відрізок [a, b] на осі абсцис на t інтервалів. Для кожного інтервалу потрібно розрахувати функції:

$$S_i(x) = k_{i_1} + k_{i_2}x + k_{i_3}x^2 k_{i_4}x^3 \tag{1}$$

причому ні самі функції, ні їх перша та друга похідні не повинні зазнавати розриву в місцях сполучення, що призводить до додаткових умов, що мають вигляд:

$$S_i(x_i) = S_{i+1}(x_i) = y_i \quad (i = 1,2,...m) \tag{2}$$

$$S_i'(x_i) = S_{i+1}'(x_i) \quad (i = 1,2,...m-1) \tag{3}$$

$$S_i''(x_i) = S_{i+1}''(x_i) \quad (i = 1,2,...m-1) \tag{4}$$

Виходить 4m невідомих та (4m-2) рівняння. Для того, щоб система мала розв’язок, потрібні ще два рівняння, в якості яких використовують додаткові умови, що накладаються на функцію та її похідні межі відрізка [a, b]. Найчастіше використовують так званий нормальний випадок, згідно з яким другі похідні кубічного сплайну на межах інтерполяційного відрізка [a, b] дорівнюють нулю.

Рішення системи з 4m рівнянь спрощується, якщо уявити сплайни у вигляді:

$$S_i(x) = ty_i + \bar{t}y_{i+1} + x_i\left[(k_{i-1} - d_i)t\bar{t}^2 - (k_i - d_i)t^2\bar{t}\right], \tag{5}$$

де $t = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$, $\bar{t} = 1 - t$, $d_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}$, $(i = 1,2,...m)$.

Нескладно показати, що при такому виборі сплайнів їх «зшивання» в точках сполучення забезпечується автоматично. Кожне з рівнянь (5), починаючи з другого, містить лише один невідомий коефіцієнт. Це дає змогу звести завдання знаходження інтерполяційних функцій (1) до вирішення системи лінійних рівнянь з невідомими коефіцієнтами k. У матричній формі система рівнянь має вигляд:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & ... & 0 \\ \Delta x_2 & 2(\Delta x1 + \Delta x_2) & \Delta x_1 & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... & 0 \\ 0 & 0 & \Delta x_m & 2(\Delta x_{m-1} + \Delta x_m) & \Delta x_{m-1} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_0 \\ k_1 \\ ... \\ k_{m-1} \\ k_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_1\Delta x_2 + d_2\Delta x_1 \\ ... \\ d_{m-1}\Delta x_m + d_m\Delta x_{m-1} \\ d_m \end{bmatrix}, \tag{6}$$

де $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$.

Знайдені в результаті розв'язання цієї системи (6) коефіцієнти *k*, підставляються в систему рівнянь (5), що дозволяє розрахувати масив точок, які визначають криву, що проходить через вузлові точки.

Для прикладу візьмемо графік системи $La_{1-x}Ln_xPO_4$ [5, 6], з кроком обчислень 0.25, x в межах від 0 до 0.5.

Після розрахунку, без використання інтерполяції кубічними сплайнами маємо такі результати (таблиця 1)

Таблиця 1 – Результати без використання інтерполяції кубічними сплайнами

№	x	y
0	0	86
1	0.25	446
2	0.5	488

Використаємо рівняння кубічного сплайна на окремомій ділянці.

$$S(x) = a + b(x - x_0) + c(x - x_0)^2 + d(x - x_0)^3 \tag{7}$$

Для двох ділянок зробимо 2 рівняння:

$$\begin{cases} S_0 = a_0 + b_0(x - x_0) + c_0(x - x_0)^2 + d_0(x - x_0)^3 \\ S_1 = a_1 + b_1(x - x_1) + c_1(x - x_1)^2 + d_1(x - x_1)^3 \end{cases} \tag{8}$$

Підставимо вхідні дані в рівняння:

$$\begin{cases} S_0 = a_0 + b_0(x - 0) + c_0(x - 0)^2 + d_0(x - 0)^3 \\ S_1 = a_1 + b_1(x - 0.25) + c_1(x - 0.25)^2 + d_1(x - 0.25)^3 \end{cases} \tag{9}$$

Отже, маємо 8 невідомих коефіцієнтів.

Для розрахунку коефіцієнтів використаємо наступні умови:

1) Сплайни повинні проходити через вузлові точки.

Сплайн $S_0 = a_0 + b_0(x - 0) + c_0(x - 0)^2 + d_0(x - 0)^3$, проходить через точки, які позначені у таблиці 2, жовтим кольором.

Таблиця 2 – Вузлові точки сплайна S_0

№	x	y
0	0	86
1	0.25	446
2	0.5	488

Сплайн $S_1 = a_1 + b_1(\mathrm{x} - 0.25) + c_1(\mathrm{x} - 0.25)^2 + d_1(\mathrm{x} - 0.25)^3$, проходить через точки, які позначені у таблиці 3, жовтим кольором.

Таблиця 3 – Вузлові точки сплайна S_1

№	x	y
0	0	86
1	0.25	446
2	0.5	488

Після підстановки та спрощення, отримаємо систему з 4 рівнянь:

$$\begin{cases} a_0 = 86 \\ a_0 + 0.25b_0 + 0.625c_0 + 0.015625d_0 = 446 \\ a_1 = 446 \\ a_1 + 0.25b_1 + 0.625c_1 + 0.015625d_1 = 488 \end{cases} \tag{10}$$

2) В стиках сплайнів повинна забезпечуватися гладкість - не повинно бути зламів та зміни кривизни.

Знайдемо першу та другу похідну кожного сплайна:

$$\begin{cases} S_0' = b_0 + 2c_0(x-0) \ + 3d_0(x-0)^2 \\ S_1' = b_1 + 2c_1(x-0.25) \ + 3d_1(x-0.25)^2 \\ S_0'' = 2c_0 + 6d_0(x-0) \\ S_1'' = 2c_1 + 6d_1(x-0.25) \end{cases} \tag{11}$$

Виконаємо умову (3) та (4), підставивши точку, позначену у таблиці 4, жовтим кольором.

Таблиця 4 – Вузлова точка умови 2

№	x	y
0	0	86
1	0.25	446
2	0.5	488

Після підстановки та спрощення, отримаємо систему з 2 рівнянь:

$$\begin{cases} b_0 + 0.5c_0 + 1.875d_0 - b_1 = 0 \\ 2c_0 + 1.5d_0 - 2c_1 = 0 \end{cases} \tag{12}$$

3) Задамо поведінку сплайнів в початковій та кінцевій точках.

Наприклад, задамо нульову кривизну сплайнів

$$\begin{cases} S_0'' = 0 \\ S_2'' = 0 \end{cases} \tag{13}$$

Підставимо в сплайни S_0'' та S_1'' точки, які позначені жовтим кольором, з таблиць 5 та 6, відповідно.

Таблиця 5 –Точка для сплайна S_0''

№	x	y
0	0	86
1	0.25	446
2	0.5	488

Таблиця 6 – Точка для сплайна S_1''

№	x	y
0	0	86
1	0.25	446
2	0.5	488

Після підстановки та спрощення, отримаємо систему з 2 рівнянь:

$$\begin{cases} 2c_0 = 0 \\ 2c_1 + 1.5d_1 = 0 \end{cases} \tag{14}$$

Отже, отримаємо систему з 8 лінійних рівнянь:

$$\begin{cases} a_0 = 86 \\ a_0 + 0.25b_0 + 0.625c_0 + 0.015625d_0 = 446 \\ a_1 = 446 \\ a_1 + 0.25b_1 + 0.625c_1 + 0.015625d_1 = 488 \\ b_0 + 0.5c_0 + 1.875d_0 - b_1 = 0 \\ 2c_0 + 1.5d_0 - 2c_1 = 0 \\ 2c_0 = 0 \\ 2c_1 + 1.5d_1 = 0 \end{cases} \tag{15}$$

Спростивши її, отмаємо:

$$\begin{cases} a_0 = 86 \\ a_1 = 446 \\ c_0 = 0 \\ 0.25b_0 + 0.015625d_0 = 360 \\ 0.25b_1 + 0.625c_1 + 0.015625d_1 = 42 \\ b_0 + 1.875d_0 - b_1 = 0 \\ 1.5d_0 - 2c_1 = 0 \\ 2c_1 + 1.5d_1 = 0 \end{cases} \tag{16}$$

Складемо систему рівнянь, у матричній формі (6).

$$\begin{bmatrix} 0.25 & 0.015625 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.25 & 0.625 & 0.015625 \\ 1 & 1.875 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.5 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 1.5 \end{bmatrix}^{-1} * \begin{bmatrix} 360 \\ 42 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1762 \\ -5110 \\ 804 \\ -3832 \\ 5110 \end{bmatrix} \tag{17}$$

В результаті отримаємо значення вільних коефіцієнтів (таблиця 7).

Таблиця 7 – Вільні коефіцієнти

a_0	86
b_0	1762
c_0	0
d_0	-5110
a_1	446
b_1	804
c_1	-3832
d_1	5110

Підставимо вільні коефіцієнти в рівняння (8), та отримаємо такі результати (таблиця 8).

Таблиця 8 – Результати з використанням інтерполяції кубічними сплайнами

№	x	y
0	0	85,65621
1	0,025	129.6339
2	0,05	173.1325
3	0,075	215.6729
4	0,1	256.7761
5	0,125	295.9629
6	0,15	332.7543
7	0,175	366.6711
8	0,2	397.2343
9	0,225	423.9648
10	0,25	446,38357
11	0,275	464.1711
12	0,3	477.6468
13	0,325	487.2899
14	0,35	493.5793
15	0,375	496.9942
16	0,4	498.0136
17	0,425	497.1167
18	0,45	494.7825
19	0,475	491.4902
20	0,5	487,71876

Побудуємо графік на основі отриманих результатів в інтелектуальній інформаційній системі прогнозування фазової стабільності твердих розчинів [7] (рисунок 1):

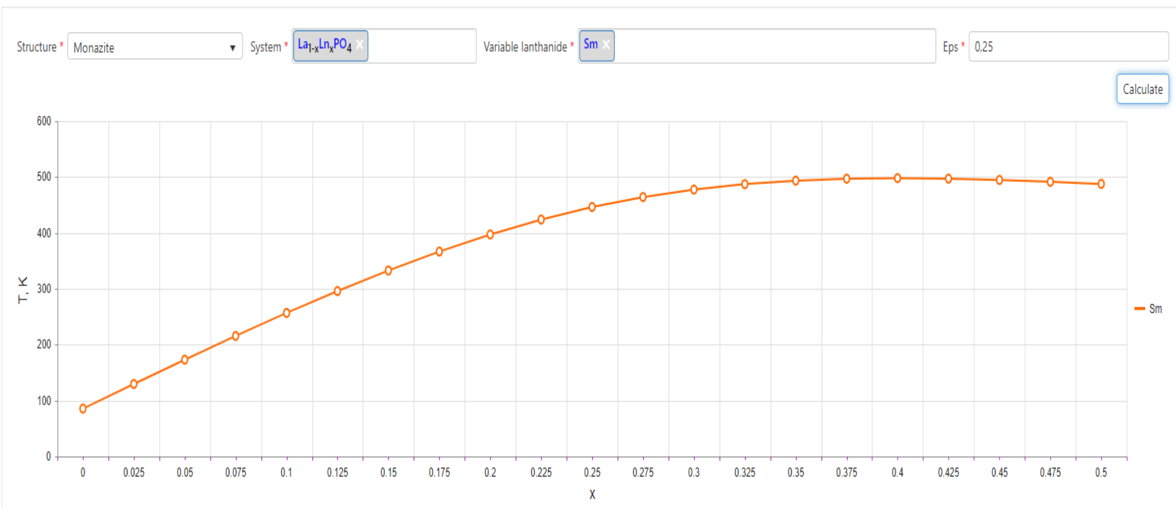

Рисунок 1 – Графік з використанням інтерполяції кубічними сплайнами

Для наочності наведено графік тієї ж самої системи, але без застосування інтерполяції (рисунок 2):

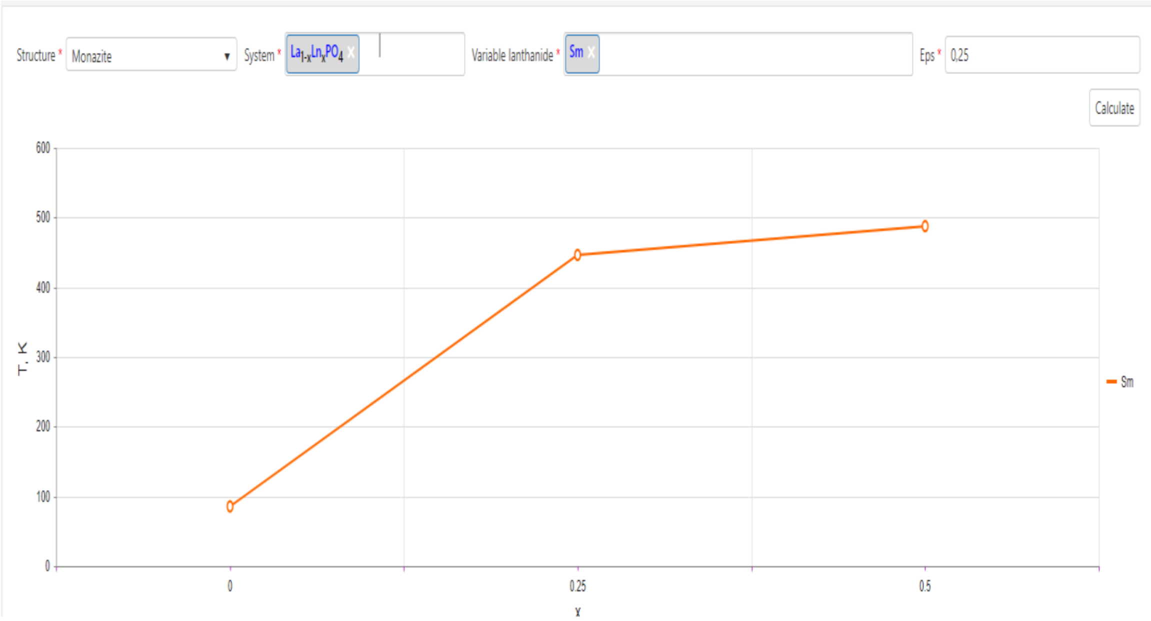

Рисунок 2 – Графік без використання інтерполяції кубічними сплайнами

Візьмемо літературні дані даної системи [8] та проведемо порівняння літературних результатів з результатами інтерполяції кубічними сплайнами та результатами без інтерполяції кубічними сплайнами (таблиця 9).

Таблиця 9 – Порівняння літературних результатів з інтерполяцією кубічними сплайнами та результатів без інтерполяції кубічними сплайнами

x	y з інтерпорпо-ляцією	y без інтер-поляції	y [7]	Δy з інтерпо-ляцією	Δy без ін-терполяції	Підвищено точність %
0	85,65621	85,65621	86	0,34379	0,34379	0
0,03	129,63	120,58572	235	105,3661	114,41428	7,908261102
0,05	173,13	155,10631	277	103,8675	121,89369	14,78845213
0,1	256,78	250,27946	330	73,2239	79,72054	8,149267428
0,15	332,75	316,67127	366	33,2457	49,32873	32,60377877
0,2	397,23	424,96536	393	4,2343	31,96536	86,75347313
0,25	446,38357	446,38357	413	33,38357	33,38357	0
0,3	477,65	478,52042	428	49,6468	50,52042	1,729241364
0,35	493,58	482,27911	440	53,5793	42,27911	-26,72759668
0,4	498,01	483,20394	448	50,0136	35,20394	-42,06818896
0,45	494,78	486,62353	452	42,7825	34,62353	-23,56481272
0,5	487,71876	487,71876	452	35,71876	35,71876	0

Дані таблиці 9, графічно представлено на рисунку 3.

Отже, порахувавши середнє значення, підвищення точності кожної точки, які наведені у таблиці 8, отримаємо 4,96%.

Висновки

В даній роботі проведено вдосконалення інтелектуальної інформаційної системи фазової стабільності твердих розчинів з використанням інтерполяції кубічними сплайнами. Було підвищено точність результатів на 4,96%. За результатами аналізу видно, що для системи La1-xLnxPO4 найкращі результати інтерполяції кубічними сплайнами досягаються на відрізку 0 – 0,25, а для того, щоб зменшити погіршення на відрізку 0,25 – 0.5, потрібно провести додаткову інтерполяцію, автори вважають, що потрібне проведення додаткових досліджень.

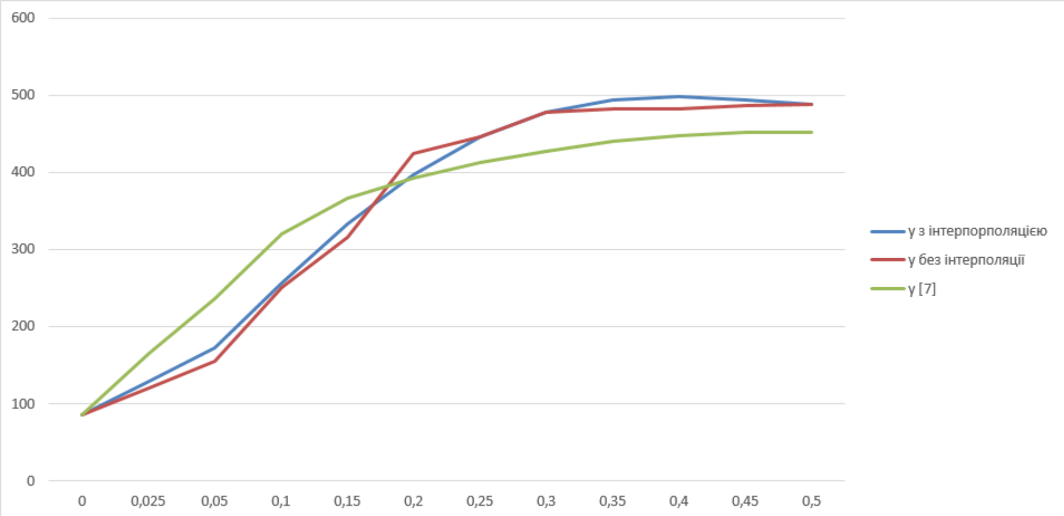

Рисунок 3 – Порівняння літературних результатів з інтерполяцією кубічними сплайнами та результатів без інтерполяції кубічними сплайнами

Список літератури

[1] Р. Н. Квєтний, В. Ю. Дементьєв, М. О. Машницький, О. О. Юдін, *Різницеві методи та сплайни в задачах багатовимірної інтерполяції*, Вінниця: УНІВЕРСУМ, с. 193, 2011.

[2] И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев, *Справочник по математике*. М.: Наука, 1981.

[3] Д. М. Королев, В. Б. Никулин, С. А. Колесников, “Застосування сплайн-функцій для обробки результатів вимірювань”, *Прилади та системи управління*, № 6, 1998.

[4] Р. Н. Квєтний, І. В. Богач, О. Р. Бойко, О. Ю. Софина, О. М. Шушура, *Комп’ютерне моделювання систем та процесів. Методи обчислень. Частина 1*, *Навчальний посібник*, 2012, с. 193.

[5] A. Meldrum, L. A. Boatner, L. M. Wang, “Ion-beam-induced amorphization of $LaPO_4$ and $ScPO_4$”, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*, vol. 127–128, pp. 160–165, 1997. doi: 10.1016 / S0168-583X (96) 00873-7.

[6] E. Grechanovsky, N. N. Eremin, V. S. Urusov, “Radiation resistance of $LaPO_4$ (monazite structure) and $YbPO_4$ (zircon structure) from computer simulation data”, *Physics of the Solid State*, vol. 55(9), pp. 1929–1935, 2013. doi: 10.1134 / S1063783413090138.

[7] O. V. Kudryk O. V. Bisikalo, Yu. A. Oleksii, S. V. Radio, “Intelligent information system for predicting chemicals with interactive possibilities”, *CoLInS, Computational Linguistics and Intelligent Systems. CoLInS 2021*. [Електронний ресурс]. Режим доступу: http://ceur-ws.org/Vol-2870/paper68.pdf.

[8] Е. И. Гетьман, Л. Б. Игнатова, С. В. Радио, “К вопросу расчета пределов замещений в твердых растворах монацитов редкоземельных элементов состава La1–xLnxPO4, где Ln = Pr – Dy”, *Вісник Донецького національного університету імені Василя Стуса, Серія хімічні науки*, №2, с. 33-40, 2017.

Стаття надійшла: 28.04.2022.

References

[1] R. N. Kvyetnyy, V. Yu. Dementiev, M. O. Mashnytsky, O.O. Yudin, *Difference methods and splines in multidimensional interpolation problems*, Vinnytsia: UNIVERSUM, p. 193, 2011 [in Ukrainian].

[2] I. N. Bronshtein and K. A. Semendyaev, *Spravochnik po matematike*. M.: Nauka. 1981 [in Russian].

[3] D. M. Korolev, V. B. Nikulin, S. A. Kolesnikov, “Device of spline functions for processing the results of simulation”, *Application of the control system*, № 6. 1998 [in Ukrainian].

[4] R. N. Kvyetnyy, I. V. Bogach, O. R. Boiko, O. Yu., Sofina, O. M. Shushura, *Computer modeling of systems and processes. Calculate methods. Part 1, Navchalny posibnik*, 2012, p. 193 [in Ukrainian].

[5] A. Meldrum, L. A. Boatner, L. M. Wang, “Ion-beam-induced amorphization of $LaPO_4$ and $ScPO_4$”, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*, vol. 127–128, pp. 160–165, 1997. doi: 10.1016 / S0168-583X (96) 00873-7.

[6] A. E. Grechanovsky, N. N. Eremin, V. S. Urusov, “Radiation resistance of LaPO4 (monazite structure) and YbPO4 (zircon structure) from computer simulation data”, *Physics of the Solid State*, vol. 55(9), pp. 1929–1935, 2013. doi: 10.1134/S1063783413090138.

[7] O. V. Kudryk, O. V. Bisikalo, Yu. A. Oleksii, S. V. Radio, “Intelligent information system for predicting chem-icals with interactive possibilities”, *CoLInS, Computational Linguistics and Intelligent Systems. CoLInS 2021*. [Online]. Available: http://ceur-ws.org/Vol-2870/paper68.pdf.

[8] E. I. Hetman, L. B. Ignatova, S. V. Radio, "On the calculation of the limits of substitutions in solid solutions of monazites of rare earth elements of the composition La1 – xLnxPO4, where Ln = Pr - Dy", *Visnyk Donetsky Vasyl Stus National University, Chemical Sciences Series*, №2, pp. 33-40, 2017 [in Russian].

Відомості про авторів

Бісікало Олег Володимирович − доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри автоматизації та інтелектуальних інформаційних технологій.

Квєтний Роман Наумович − доктор технічних наук, професор, професор кафедри автоматизації та інтелектуальних інформаційних технологій.

Кудрик Олексій Володимирович − аспірант групи 126-21а, кафедра автоматизації та інтелектуальних інформаційних технологій.

Олексій Юлія Анатоліївна − студентка групи М20_д/102_ХМ, кафедра неорганічної, органічної та аналітичної хімії.

O. V. Bisikalo [1], R. N. Kvyetnyy [1], O. V. Kudryk [1], Y. A. Oleksii [2]

INTRODUCTION OF INTERPOLATION BY CUBIC SPLINES INTO INTELLIGENT INFORMATION SYSTEM FOR PREDICTING OF PHASE STABILITY OF SOLID SOLIDS

[1] Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia

[2] Vasyl` Stus Donetsk National University, Vinnytsia