

РОЗВИТОК НАУКОВОЇ ДУМКИ ПОСТІНДУСТРІАЛЬНОГО СУСПІЛЬСТВА: СУЧАСНИЙ ДИСКУРС

13 ЛИСТОПАДА 2020 РІК

М. МИКОЛАЇВ, УКРАЇНА

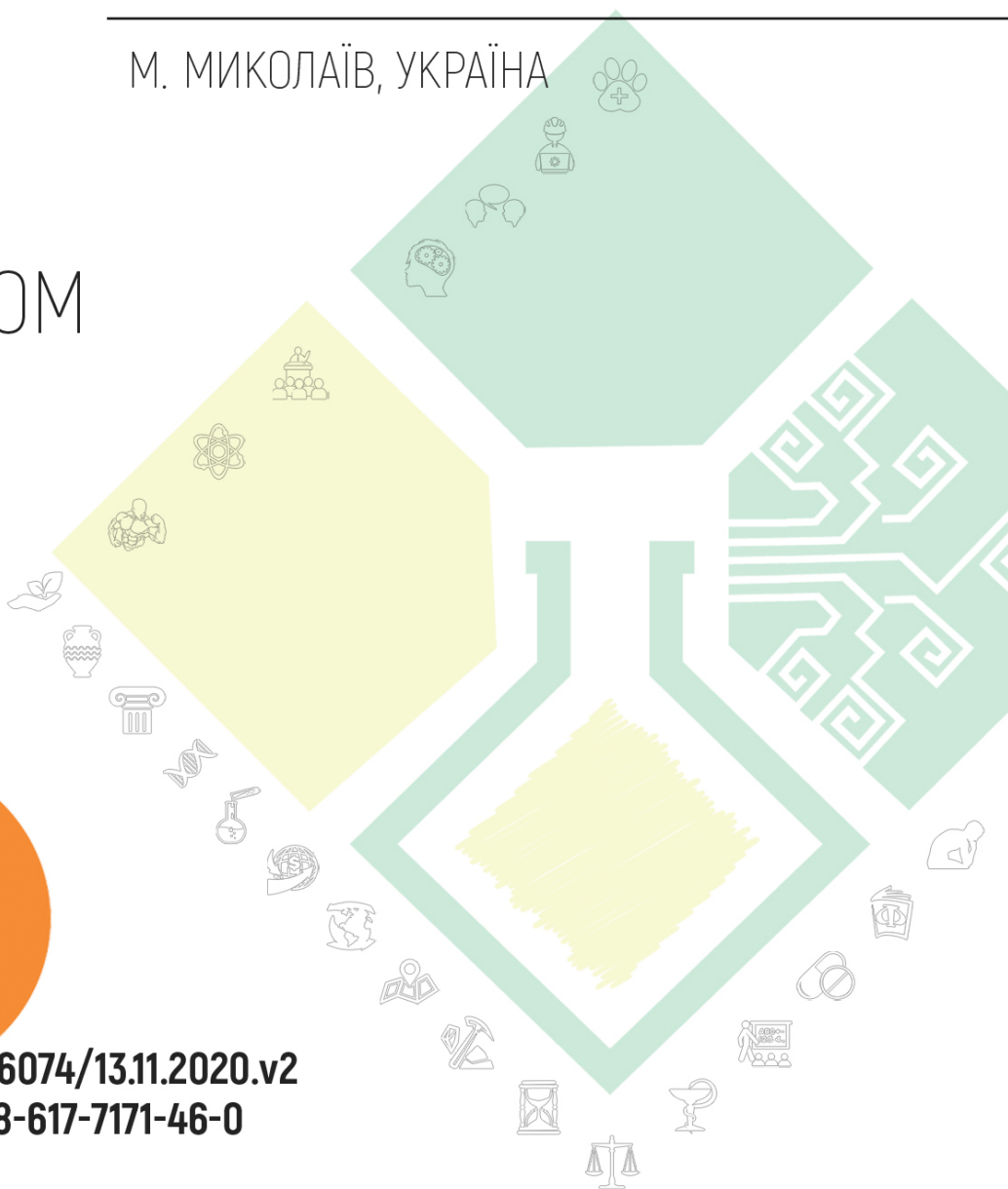
2 ТОМ



**OPEN
ACCESS**

DOI 10.36074/13.11.2020.v2

ISBN 978-617-7171-46-0



МАТЕРІАЛИ
МІЖНАРОДНОЇ
НАУКОВОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ



РОЗВИТОК НАУКОВОЇ ДУМКИ ПОСТІНДУСТРІАЛЬНОГО СУСПІЛЬСТВА: СУЧАСНИЙ ДИСКУРС

13 ЛИСТОПАДА 2020 РІК

2

ТОМ

Миколаїв ♦ Україна



Голова оргкомітету: Рабей Н.Р.

Верстка: Білоус Т.В.

Дизайн: Бондаренко І.В.

Р 64 **Розвиток наукової думки постіндустріального суспільства: сучасний дискурс:** матеріали міжнародної наукової конференції (Т. 2), 13 листопада, 2020 рік. Миколаїв, Україна: МЦНД.

ISBN 978-617-7171-46-0

DOI 10.36074/13.11.2020.v2

Викладено матеріали учасників міжнародної мультидисциплінарної наукової конференції «Розвиток наукової думки постіндустріального суспільства: сучасний дискурс», яка відбулася у місті Миколаїв 13 листопада 2020 року.

Конференцію зареєстровано Державною науковою установою «УкрІНТЕІ» в базі даних науково-технічних заходів України та інформаційному бюлетені «План проведення наукових, науково-технічних заходів в Україні» (Посвідчення № 448 від 05.10.2020).

Матеріали конференції знаходяться у відкритому доступі на умовах ліцензії Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).



Всі роботи збірника відображені в Google Scholar. Роботи, що містять цифровий ідентифікатор DOI індексуються в ORCID, CrossRef та OUCI (Український індекс наукового цитування).

СЕКЦІЯ VIII. ХІМІЧНІ НАУКИ

DOI 10.36074/13.11.2020.v2.05

USING RADIAL BASIS FUNCTION NEURAL NETWORK FOR PREDICTION OF SOLUBILITY OF 1-1 ELECTROLYTES IN NONAQUEOUS SOLVENTS

Yaroslava Pushkarova

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor,
Associate Professor of Medical and General Department
Bogomolets National Medical University, Kyiv, Ukraine

Valentina Panchenko

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor,
Associate Professor of Inorganic Department
V.N. Karazin Kharkiv National University, Kharkiv, Ukraine

Actuality. Accurate knowledge of true, non-idealized behavior of aqueous and nonaqueous electrolyte solutions over wide ranges of pressure and temperature is of significant importance to chemistry, chemical engineering, energy, materials and pharmaceutical industries. Applications of electrolyte solutions are very versatile and include, in particular, development and delivery of drugs, control of water pollution, food processing and so on. Generally, solubility constitutes one of the most important physical-chemical properties of a substance [1–3].

Theory and data processing details. Artificial neural network (ANN) is a flexible mathematical model. Various types of ANN are known in the literature. The radial basis function network (RBFN) is among the most commonly used types of ANNs [4, 5]. The present work investigates applicability of the RBFN model for prediction of solubilities of such common salts as NaI, CsClO₄ and NaBr in a variety of nonaqueous solvents and solvent mixtures [6]. The model uses experimental data available in the literature in order to train the ANN. Once trained, the ANN can be used to predict solubilities of other, related systems. The computations involved in the RBFN have been performed using the MATLAB 7.11b.

Cross-validation was used to estimate the capability of the artificial neural network. In order to characterize prediction capacity the root mean squared error (RMSECV) of cross-validation was used:

$$\text{RMSECV} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (t_i - y_i)^2}{N}},$$

where t_i and y_i refer to the actual value and predicted value for sample i , respectively; N is the number of samples in a testing set. The 4-fold, 3-fold, 2-fold cross-validation procedure was applied.

Results and discussion. Table 1 shows the cross-validation errors for prediction of mole fraction solubility of NaI in different mixtures.

Table 1

Values of cross-validation errors for prediction of mole fraction solubility of NaI in different mixtures at different mixtures

Type of cross-validation	RMSECV		
	water/methanol mixtures (313.15 K)	water/ethanol mixtures (298.15 K)	water/propan-2-ol mixtures (303.15 K)
4-fold	0.048	0.083	0.063
3-fold	0.019	0.250	0.089
2-fold	0.0077	0.022	0.043

Table 2 shows the cross-validation errors for prediction of solubility of CsClO₄ in the propylene glycol/methanol mixtures at 288.15 K.

Table 2

Values of cross-validation errors for prediction of solubility of CsClO₄ in the propylene glycol/methanol mixtures at 288.15 K

Type of cross-validation	RMSECV
4-fold	0.0028
3-fold	0.00067
2-fold	0.00039

Table 3 shows the cross-validation errors for prediction of solubility of NaBr in nitromethane/methanol mixtures at 293.15 K. For the last solute / solvent composition 4-fold cross-validation procedure was not applied, because this data set includes just 9 samples.

Table 3

Values of cross-validation errors for prediction of solubility of NaBr in nitromethane/methanol mixtures at 293.15 K

Type of cross-validation	RMSECV
3-fold	0.083
2-fold	0.017

From Tables 1-3, it is evident that RBFN is effective at different size of training set.

Conclusions. By choosing a not large training set of experimental data from the literature, we have employed the RBFN algorithm, which allowed us to calculate accurately the salt solubilities over broad ranges of solvent composition, solute concentration and temperature. So, we are able to calculate accurately the solubilities of the 1-1 electrolytes for other temperatures, concentrations and solvent compositions without the need for additional experimental measurements.

References:

- Sheridan, Q. R., Schneider, W. F., Maginn, E. J. (2016). Anion Dependent Dynamics and Water Solubility Explained by Hydrogen Bonding Interactions in Mixtures of Water and Aprotic Heterocyclic Anion Ionic Liquids. *J. Phys. Chem. B*, (120, 49), 12679–12686.
- Boucher, D., Howell, J. (2016). Solubility Characteristics of PCBM and C-60. *J. Phys. Chem. B*, (120, 44), 11556–11566.
- Hardy, A., Bock, H. (2016). Assessing the Quality of Solvents and Dispersants for Low-Dimensional Materials Using the Corresponding Distances Method. *J. Phys. Chem. B*, (120, 44), 11607–11617.
- Turkson, R. F., Yan, F., Ali, M. K. A., Hu, J. (2016). Artificial neural network applications in the calibration of spark-ignition engines: an overview. *JESTEC*, (19, 3), 1346–1359.
- Marini, F. (2009). Artificial neural networks in food analysis: trends and perspectives. A review. *Anal. Chim. Acta*, (635), 121–131.
- Pushkarova Ya. & Panchenko V. (2020). Prediction of the solubility of 1-1 electrolytes in nonaqueous solvents with the use of the radial basis function artificial neural network. *Do desenvolvimento mundial como resultado de realizações em ciência e investigação científica: Coleção de trabalhos científicos «ΛΟΓΟΣ» com materiais da conferência científico-prática internacional*. (Vol. 2, pp. 67–68). 9 de outubro, 2020, Lisboa, Portugal. DOI: <https://doi.org/10.36074/09.10.2020.v2.17>.