

ΛΌΓΟΣ

COLEÇÃO DE TRABALHOS CIENTÍFICOS



AARTE DO PENSAMENTO CIENTÍFICO

COM MATERIAIS DA CONFERÊNCIA CIENTÍFICO-PRÁTICA INTERNACIONAL

DO DESENVOLVIMENTO MUNDIAL COMO RESULTADO DE REALIZAÇÕES EM CIÊNCIA E INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA

9 DE OUTUBRO DE 2020 • LISBOA, PORTUGAL

VOLUME 2



DOI 10.36074/09.10.2020.v2

ISBN 978-972-575-157-2



EUROPEAN
SCIENTIFIC
PLATFORM

ΛΌΓΟΣ

COLEÇÃO DE TRABALHOS CIENTÍFICOS

COM MATERIAIS DA CONFERÊNCIA
CIENTÍFICO-PRÁTICA INTERNACIONAL

**«DO DESENVOLVIMENTO MUNDIAL
COMO RESULTADO DE REALIZAÇÕES EM
CIÊNCIA E INVESTIGAÇÃO CIENTÍFICA»**

9 DE OUTUBRO DE 2020

VOLUME 2

Lisboa • Portugal



Presidente da comissão organizadora: Holdenblat M.

Layout: Bilous T.

Projeto: Bondarenko I.

D 68 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), 9 de outubro de 2020. Lisboa, Portugal: Plataforma Científica Europeia.

ISBN 978-972-575-157-2 («Contexto», Portugal)

DOI 10.36074/09.10.2020.v2

São apresentados os materiais dos participantes da conferência internacional científico-prática multidisciplinar «Do desenvolvimento mundial como resultado de realizações em ciência e investigação científica», que aconteceu em Lisboa em 9 de outubro de 2020.



A conferência está incluída no catálogo de conferências científicas internacionais; aprovado pela ResearchBib e UKRISTEI (Certificado № 389 del 16/09/2020); certificado pelo Euro Science Certification Group (Certificado № 22179 del 18/09/2020).

Os materiais da conferência estarão disponíveis ao público sob a Licença Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).



A descrição bibliográfica dos materiais da conferência é indexada por CrossRef, ORCID, Google Scholar, ResearchGate, OpenAIRE e OUCI.

UDC 001 (08)

ISBN 978-972-575-157-2

© Participantes da conferência, 2020
© Coleção de trabalhos científicos «ΛΟΓΟΣ», 2020
© Plataforma Científica Europeia, 2020

DOI 10.36074/09.10.2020.v2.17

PREDICTION OF THE SOLUBILITY OF 1-1 ELECTROLYTES IN NONAQUEOUS SOLVENTS WITH THE USE OF THE RADIAL BASIS FUNCTION ARTIFICIAL NEURAL NETWORK

Yaroslava Pushkarova

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of Medical and General Department
O. O. Bohomolets National Medical University

Valentina Panchenko

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

UKRAINE

Determination of the solubility of electrolytes in a wide range of temperatures and pressures is a one of the experimental problems of modern electrochemistry. Currently has considerable theoretical and experimental data on the solubility of substances in water. Much less material is devoted to solubility in nonaqueous solvents.

The main tasks of our work are literature search of the experimental data on the solubility 1-1 electrolytes in nonaqueous solvents and using this information for prediction of the solubility of 1-1 electrolytes in nonaqueous solvents with the use of the radial basis function artificial neural network (RBFANN) at the new composition of the mixed solvent. 1-1 electrolytes and solvents used in this work are shown in Table.

Nº	Electrolyte	Solvent	Mole fraction of solvent	Temperature, K
1	CsClO_4	Mixture of propylene glycol and ethanol	0.000, 0.105, 0.196, 0.292, 0.393, 0.491, 0.577, 0.651, 0.801, 0.898, 1.000 (propylene glycol)	288.15, 298.15, 308.15, 318.15, 328.15
2	NaCl	Mixture of acetonitrile and methanol	0.000, 0.074, 0.128, 0.249, 0.359, 0.465, 0.568, 0.665, 0.753, 0.839, 0.922, 0.964 (methanol)	288.15, 298.15, 308.15, 318.15
3	NaBr	Mixture of nitromethane and methanol	0.000, 0.250, 0.350, 0.450, 0.650, 0.800, 0.900, 0.950, 1.000 (nitromethane)	293.15, 303.15, 313.15, 323.15

Equations of the following forms have also been used for prediction of solubility of electrolytes:

$$S = (a_0 + a_1 \cdot T) + (b_0 + b_1 \cdot T) \cdot x + (c_0 + c_1 \cdot T) \cdot x^2, \quad (1)$$

$$S = a_0 + b_0 \cdot x + c_0 \cdot x_1, \quad (2)$$

where S – solubility,

$a_0, a_1, b_0, b_1, c_0, c_1$ – coefficients,

x – mole fraction of solvent,

x_1 – temperature.

The best description of the experimental data has been obtained with the use of RBFANN (see Figure), maximum value of relative standard deviation from the experimental values is 1.7 %. Also we obtained satisfactory results for solubility of electrolytes at new compositions of mixed solvents. Using equations (1), (2) do not lead to satisfactory results and sometimes produce negative solubility. The results of the work make it possible to predict the solubility of 1-1 electrolytes in mixed solvent without making experimental research.

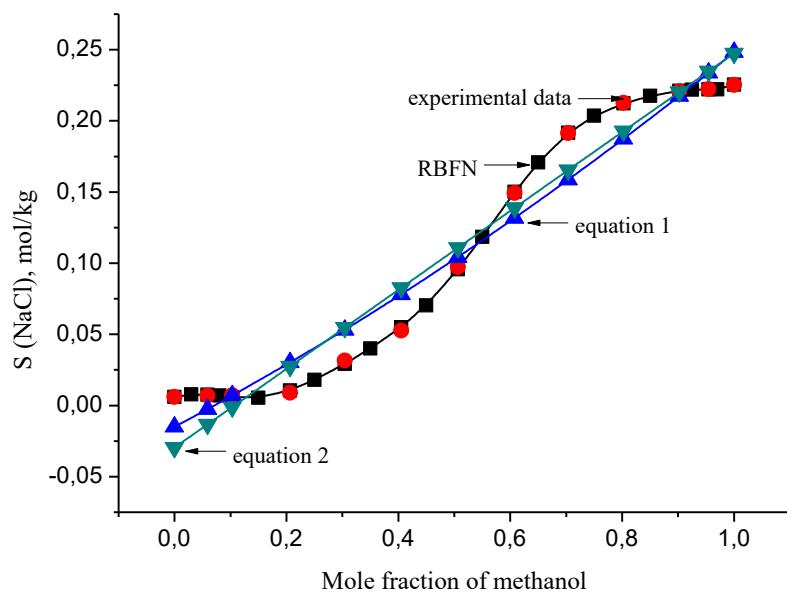


Fig. Dependence of solubility of NaCl on the mole fraction of methanol at temperature 288.15 K