

# スマートものづくりセミナーのご案内

和歌山県工業技術センターでは、企業の皆様の開発活動支援に向けて、計算機シミュレーション及び機械学習に関連したソフトウェアの導入や活用を進めています。今回、当所での活用事例に加えて、兵庫県立工業技術センターでの活用事例もご紹介させていただきます。

## 本セミナーでわかること

- ・ 計算機シミュレーションや機械学習について
- ・ 製造や開発における効率化の例
- ・ 工業技術センターでできること

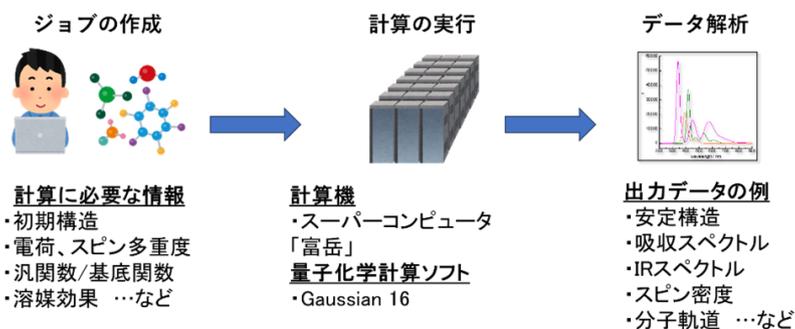
**日時** 令和6年 **7月19日(金)** 13:30 ~ 16:00 ※ 現地開催のみ

**場所** 和歌山県工業技術センター 研究交流棟6階 研修室 (和歌山市小倉 60)

## 量子化学計算を用いた金属錯体の酸化還元特性の評価

兵庫県立工業技術センター 河野 雅博氏

量子化学計算を用いて、分子の構造最適化や各種スペクトルのシミュレーションと帰属、分子軌道の描画やスピン密度の解析等、分子の性質に関する様々な解析が可能です。今回は、金属錯体を酸化還元した際のスペクトルや構造について、計算でシミュレーションした例を実際の分析値と比較しながら紹介します。

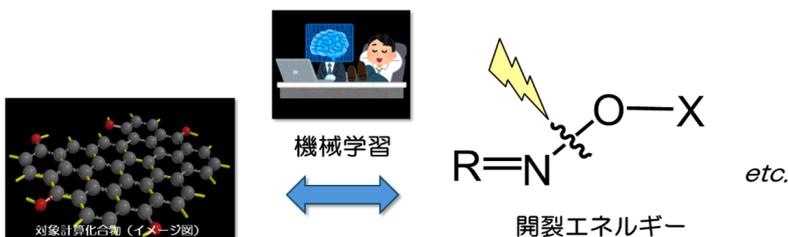


## マテリアルズインフォマティクスの実践に向けた実用的機械学習モデル作成

- 開始剤の開裂エネルギー、ポリイミドの誘電率、高屈折材料など -

和歌山県工業技術センター 森 一

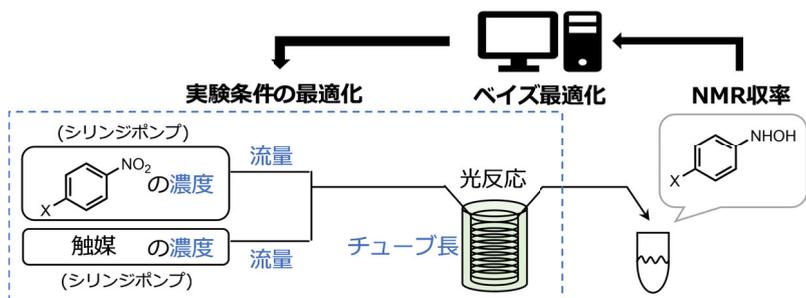
工業技術センターではこれまでに機械学習の例として、基本的な化学物性（沸点、引火点など）の事例を紹介してきました。今回はより実用的な事例として材料物性値等に関する事例について紹介します。



## 有機合成における機械学習を利用した条件最適化検討

和歌山県工業技術センター 芳井 朝美

機械学習の一つであるベイズ最適化は、最適条件を見つける手法として有用です。今回は、その手法を用いて、有機合成実験における反応条件の最適化検討に利用しましたので、一連の利用方法や実験結果を紹介します。



参加費：無料

申込方法：下記 URL または QR コードを読み取り、必要事項をご記入ください。  
<https://www.wakayama-kg.jp/web-form/2024/06/6719.html>

申込締切：2024年7月17日(水)

お問合せ先：和歌山県工業技術センター 化学技術部 芳井(よしい)

TEL：073-477-1271 e-Mail：yoshii@wakayama-kg.jp

