



- 多くの自動実験装置はAIによる実験条件提案機能が付与されていない。
- 人が自動実験装置とAIを繋ぎ、クロズドループを形成させる必要があった。
- 人が介入しない自動自律実験のクロズドループを作るためのソフトウェアNIMOを開発。

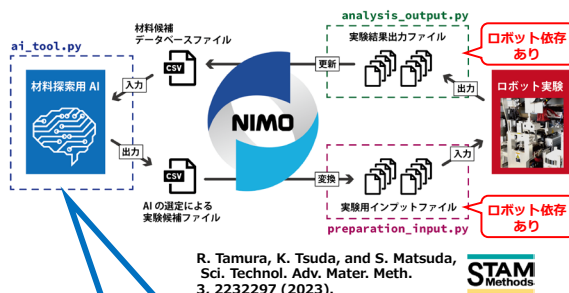
キーワード：自動自律実験, AI, マテリアルズインフォマティクス

自動駆動型研究支援ソフトウェアNIMO

自律駆動による研究革新を実現するには、
探索アルゴリズムとロボット実験装置を
シームレスに連携させるプラットフォームが必要



人が介入しない材料探索を可能に！



NIMOで扱うデータファイル

添加物リスト例

添加物 1	添加物 2	添加物 3	添加物 4	放电時間
0	0	0	1	980
0	0	1	0	1022
0	0	1	1	0
0	1	0	0	0
0	1	0	1	0
0	1	1	1	0
1	0	0	0	887
1	0	0	1	0
1	0	1	0	0
1	1	0	0	0
1	1	0	1	0
1	1	1	1	0
1	1	1	0	0
1	1	1	1	0

扱うデータファイルを“標準化”
することで、複数のアルゴリズムが
利用可能に！

実験結果がある場合
実験値を入力

実験結果がない場合空欄
この空欄から次の条件を選定

全ての実験条件を
リストアップ

他の入力ファイル例

連続変数探索リストの例

温度	圧力	Obj
1450	5	
1450	6	
1450	7	
1450	8	
1450	9	
1500	5	
1500	6	
1500	7	
1500	8	
1500	9	
1550	5	
:	:	

有機分子探索リストの例

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	...	Obj
1	0	1	1	0	1	1	1	1	0	0	...	
1	1	1	1	0	1	0	1	0	1	0	...	
1	1	0	1	0	1	0	0	1	1	1	...	
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	...	

無機材料探索リストの例

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	...	Obj
11.5	58.2	24.4	582.8	10.5	2.5	96.5	2.4	1.7	2	1.7	...	
10	84	20.0	598.8	15.3	2.3	81	2.9	2	3.3	0	...	
15	71.8	31.4	902.0	11.5	3.1	123.6	1.5	2	0.7	1.2	...	
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	...	



標準実装アルゴリズム例

ベイズ最適化PHYSBO

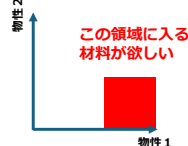
良い特性を持つ材料を
少ない実験回数で見つけたい！



複数提案
多目的最適化に対応

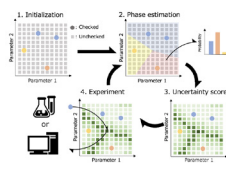
PTRアルゴリズム

特定の物性値を持つ材料を
少ない実験回数で
見つけたい！



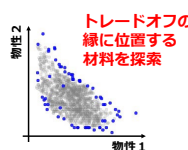
相図作成PDC

相図・状態図を
少ない実験で描きたい！



無目的探索BLOX

材料特性空間の分布を
俯瞰的に見たい！



NIMO搭載自動実験装置

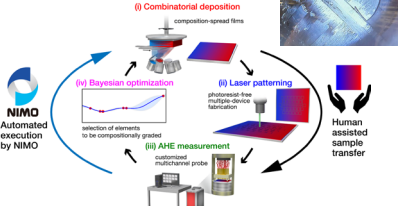
電気化学自動実験



化学合成自動実験



組成傾斜薄膜合成実験



MITライセンスで公開中

<https://github.com/NIMS-DA/nimo>



\$pip install nimo
でインストール可能



研究者
プロフィール



ポスターPDF

こんな応用分野（製品）に活かせる！

- 次世代電池開発
- 新化合物合成による機能性分子開発・創薬
- 高感度磁気センサやHDドライブのリードヘッド開発

こんな企業と連携したい！

- 自動実験装置を開発したい
- 材料開発をAI実験条件提案で自律化させたい
- 材料開発の目的があるが適した装置がない