



自律自動実験のための汎用ソフトウェア：NIMS-OS を開発

～ロボット実験と材料探索用 AI の連携プラットフォーム～

配布日時：2023年7月20日14時

国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）

概要

1. NIMS は、ロボット実験装置と材料探索用人工知能（AI）を人が介入することなく連携させ、自律自動材料探索を可能とするための汎用ソフトウェア、NIMS-OS（NIMS Orchestration System）を開発し、オープンソースソフトウェアとして公開しました。

2. 材料開発の DX が注目され、DX を加速する基盤技術の開発が重要になっています。材料を合成し、評価までを自動で行うロボット実験装置の開発や、既存の材料データを解析し、次に検討すべき材料を提案する材料探索用 AI の開発が活発化しています。一方で、ロボット実験装置と材料探索用 AI は、各々の開発が個別に進められてきたため、双方が有機的に連携していないことがシステム全体の問題となっていました。

3. 今回研究チームは、ロボット実験装置および材料探索用 AI など、それぞれをモジュールとして扱うことで、任意のロボット実験装置と AI の組み合わせにおいても、自律自動材料探索を容易に実施可能とするミドルウェア NIMS-OS を開発しました。材料探索用 AI としては、ベイズ最適化手法を含め、3種類のプログラムが標準的に搭載されています。また、独自に作成した材料探索用 AI も実装できるため、新しいアルゴリズムを開発した際に、即座にロボット実験装置に適用することができます。

4. 研究チームは、NIMS-OS の有効性を実証するためのモデル実験として、NIMS 電気化学自動実験ロボット（NAREE）を NIMS-OS で制御し、リチウム金属電極用電解質の探索を実施しました。NIMS-OS を利用することで、ロボットと AI のシームレスな連携が可能となり、ベイズ最適化手法を用いた電解質探索の自律自動実験に成功しました。

5. 今後、日本国内外の様々なロボット実験装置との連携機能ならびに、NIMS が開発した研究データ自動蓄積システム RDE へのデータ転送機能を NIMS-OS に実装することで、データ利活用による材料開発プラットフォームを形成し、材料探索の加速化・革新材料の発見に貢献します。

6. 本研究は、データ駆動型アルゴリズムチーム 田村亮チームリーダー、津田宏治 NIMS 招聘研究員（東京大学大学院 新領域創成科学研究科 メディカル情報生命専攻 教授）、電気化学スマートラボチーム 松田翔一チームリーダーからなる研究チームによって行われました。

7. 本研究成果は、Science and Technology of Advanced Materials: Methods 誌において、2023年7月20日（日本時間）にオンライン掲載されました。NIMS-OS は、GitHub (<https://github.com/nimsos-dev/nimsos>) で公開しています。



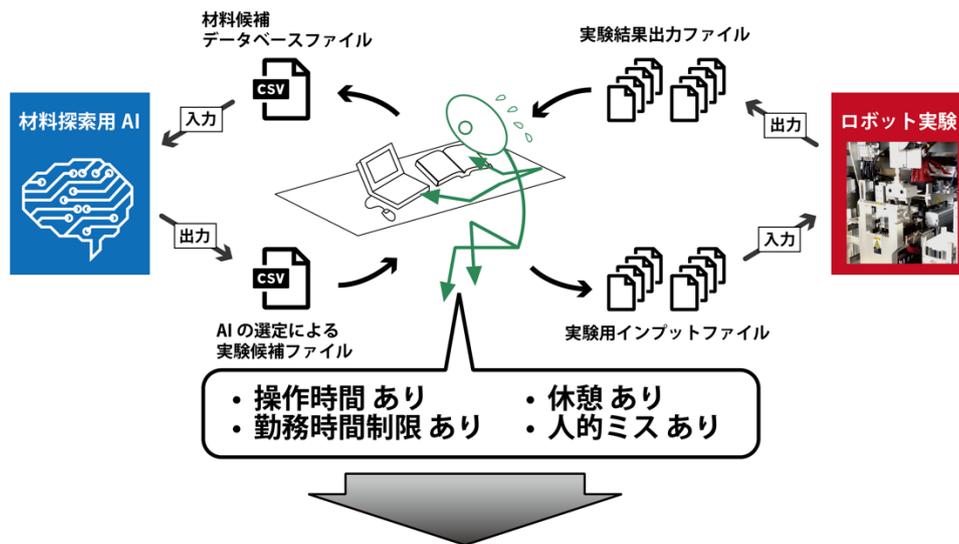
自律自動実験のための汎用ソフトウェア NIMS-OS

* 物質・材料研究機構は、その略称を NIMS（National Institute for Materials Science）に統一しております。

研究の背景

材料設計指針を立てるための人工知能（AI）と、設計指針に従い材料合成・評価を行うロボット実験装置が連携することで、これまで材料研究者が人の手でやってきた新材料開発を、人が介することなく実施できるようになります。これは自律自動実験による材料探索であり、材料開発のDX^①と捉えることができるため、大学や研究機関だけでなく産業分野でも注目を集める分野です。マテリアルズ・インフォマティクス研究の進展により、材料データを解析することで材料設計指針を抽出し、次に検討すべき材料を提案する材料探索用 AI が数多く開発されています。また、ロボット実験装置の高性能化や、実験室のスマートラボ化により、自動で材料合成・評価を行うシステムが動き始めています。これまで、材料探索用 AI と自動実験・評価装置は、各々の開発が個別に進められてきたため、自律自動材料探索を実施するにあたって、これらが有機的に連携していないことが問題となっていました（図1）。

これまでの AI とロボット実験連携



NIMS-OS による AI とロボット実験のシームレス連携

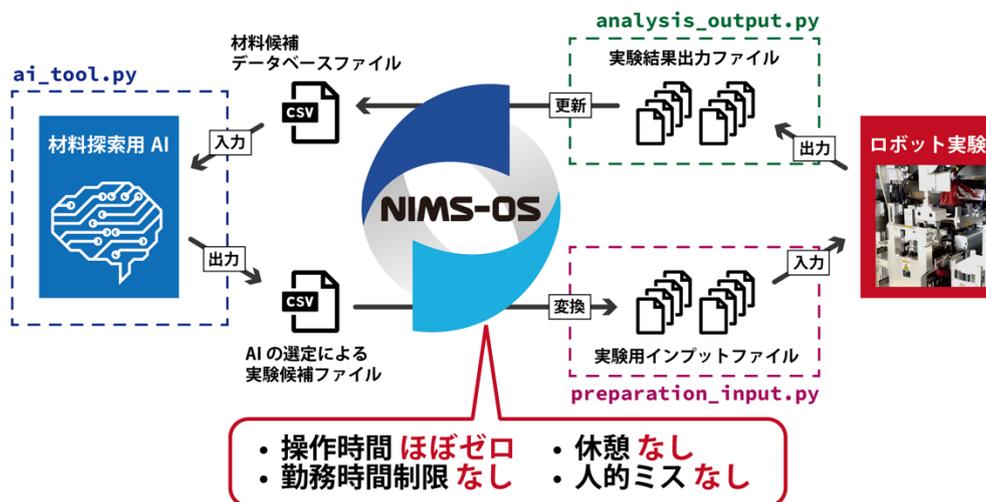


図1 NIMS-OS が築く材料探索用 AI とロボット実験のシームレス連携。これまで人が行っていた操作を自動化することで、高速・休憩なし・ミスなしの連携が可能となります。NIMS-OS では、3つのプログラムを繰り返し実行することで、自律自動材料探索を行うことができます。材料探索用 AI (ai_tool.py) はオリジナルで作成したものも利用することができるため、新アルゴリズムを開発した際に、すぐにロボット実験を用いた性能検証を行うことができます。

研究内容と成果

研究チームは、材料探索用 AI とロボット実験をシームレスに連携させる汎用的ミドルウェアとして、NIMS-OS (NIMS Orchestration System) を開発し、オープンソースソフトウェアとして公開しました(図 1)。NIMS-OS では、ロボット実験装置、材料探索用 AI をそれぞれモジュールとして扱うことで、様々な組み合わせで自律自動材料探索が実施できるように設計されています。複数の材料探索用 AI アルゴリズムの組み合わせや、ロボット実験装置間の有機的な連携が可能となります。現在、材料探索用 AI として、より少ない実験回数で、よりよい物性を持つ材料を見つけるためのベイズ最適化手法 (PHYSBO) ⁽²⁾、材料特性の限界を知るための無目的探索手法 (BLOX) ⁽³⁾、相図・状態図を作成するためのアクティブラーニング手法 (PDC) ⁽⁴⁾が利用可能です。また、ロボット実験装置として、NIMS 電気化学自動実験ロボット (NAREE) ⁽⁵⁾を利用することができます。今後、新しい材料探索用 AI や国内外のロボット実験装置用モジュールを開発し、順次公開していく予定です。

NIMS-OS は Python 言語⁽⁶⁾で実装されており、主に3種類のプログラムで構成されています(図 1)。ai_tool.py は、材料探索用 AI を使用し、材料候補をリストアップしたデータベースファイルから、次に実験すべき材料候補を1つまたは複数選定するプログラムです。次のステップとして、選定された材料候補に対する実験をロボットに行わせる必要があります。これを行うのが、preparation_input.py であり、ロボット実験に対するインプットファイルを作成し、ロボット実験をスタートさせる機能を持っています。次に、ロボット実験が終わると、結果を解析し、材料候補データベースファイルをアップデートする必要があります。これを担うのが analysis_output.py です。NIMS-OS では、この3つの Python プログラムが順に読み出されることにより、材料探索用 AI とロボット実験がシームレスに連携し、人が介入しない自律自動材料探索を実施することができます。また、ユーザビリティの観点から、GUI⁽⁷⁾アプリケーションも開発し公開しています。これはNIMS-OS の Python バージョンのインストール後に、利用することができます。GUI アプリケーションの操作画面を図2に示します。材料探索用 AI とロボット実験の繰り返し回数、一度に並列実施する実験数、使いたい材料探索用 AI とロボット実験装置を選ぶことで、自律自動材料探索を制御できます。ここでオリジナルの新しい AI アルゴリズムやロボット実験用モジュールを用意することで、容易に独自の自律自動実験による材料探索を行うことができます。

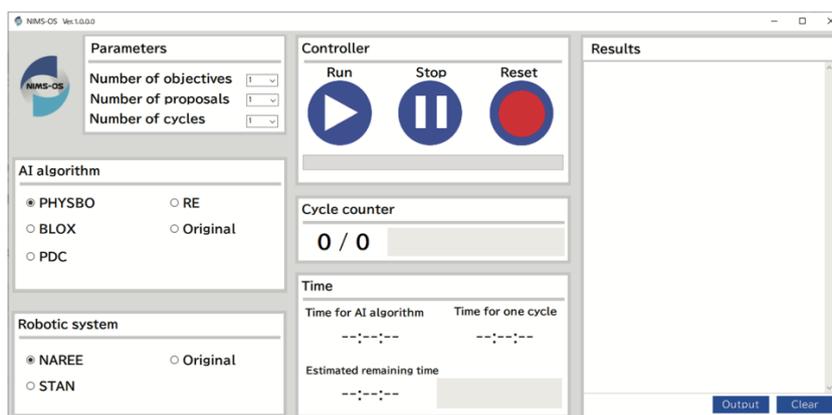


図2 NIMS-OS GUI バージョンの操作画面。材料探索用 AI およびロボット実験装置をラジオボタンで選択し、Run ボタンをクリックすることで自律自動材料探索がスタートします。探索にかかる残り時間や、探索結果がリアルタイムで表示されます。

実証実験として、NIMS-OS によって制御された NIMS 電気化学自動実験ロボット (NAREE) とベイズ最適化により、リチウム金属電極用電解質の自律自動探索を行いました。16 種類の添加剤のうち、5つを混ぜ合わせて電解質を合成 (候補数は全部で 4,368 個) した際に、放電時間が最大となる添加剤の組み合わせを探索しました。ここで、放電時間が長いほど、より多くのエネルギーを出力することができるため、電池として性能の高い電解質であるといえます。実験は、並列実験数を 32 に設定し、ランダム実験を 1 回、ベイズ最適化とロボット実験の連携を 11 サイクル実施することで、合計 384 個について電解質合成・電池評価を行いました。その結果、ベイズ最適化の 6 サイクル目において、最も高い性能を示す添加剤の組み合わせを発見しました (図 3)。特筆すべきことに、上記の一連の自動実験において、途中溶液を補充する操作を 1 回行った以外に、人間の介入は一切ありません。以上の結果は、ロボットと AI のシームレスな連携によって電解質探索の自動自律実験が可能であることを示すものです。

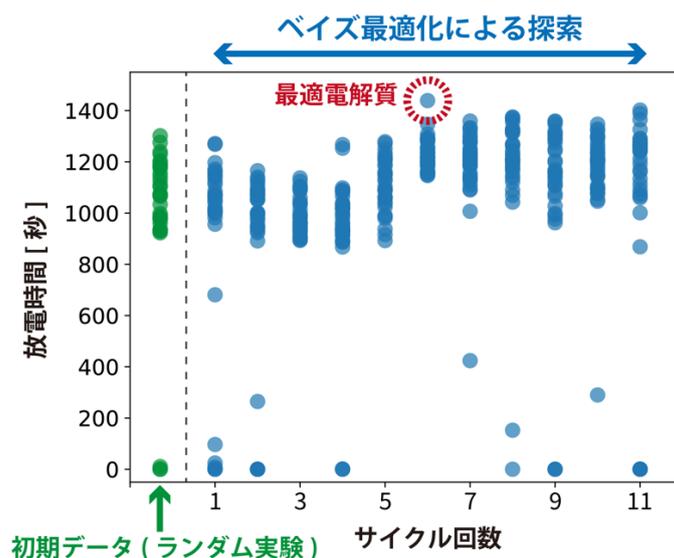


図 3 NIMS 電気化学自動実験ロボット (NAREE) とベイズ最適化の組み合わせによるリチウム金属電極用電解質の探索結果。最初、NAREE を用いてランダムに 32 個の電解質を合成し、電池評価を行いました。それを初期データとして、機械学習による電池評価予測結果を利用することで、有望な電解質を提案できるベイズ最適化を、1 回の並列実験数を 32 個に設定し 11 サイクル実施しました。6 サイクル目に最も良い電解質が得られました。

今後の展開

以上のように、研究チームは、材料探索用 AI とロボット実験を連携させる NIMS-OS を開発し、NIMS 電気化学自動実験ロボットに適用することで、電解質材料開発の自律自動実験実証に成功しました。今後開発する様々な材料探索用 AI を、NIMS-OS を介してロボットに適用することで、電解質材料の自律自動探索のさらなる高度化が期待されます。また、NIMS が開発したデータ自動蓄積システム RDE[®]に測定データを自動的に登録する機能や、日本国内外の様々なロボット実験装置との連携機能を、NIMS-OS に追加していく計画です。NIMS-OS を利用することで、国内外の様々なロボット実験装置から RDE にデータが自動蓄積され、それを活用した材料探索の加速、革新材料の発見が可能となります。さらには、NIMS-OS を介したロボット実験間連携により、広域なデータを対象とした自律自動実験の実現が期待されます。このように、今回研究チームが開発した NIMS-OS は、今後のデータ利活用型材料探索の発展に大きく貢献するものです。

本研究は、文部科学省「データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業」、東京大学「再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点 (DX-GEM)」の研究開発の一環として行われました。

関連サイト

NIMS-OS Python バージョン公開先 : <https://github.com/nimsos-dev/nimsos>

NIMS-OS GUI バージョン公開先 : <https://github.com/nimsos-dev/nimsos-gui>

日本語マニュアル : <https://nimsos-dev.github.io/nimsos/docs/jp/index.html>

動作例紹介動画 : https://www.nims.go.jp/news/press/2023/07/202307200-att/nimsos_movie.mp4

掲載論文

題目 : NIMS-OS: An automation software to implement a closed loop between artificial intelligence and robotic experiments in materials science

著者 : Ryo Tamura, Koji Tsuda, and Shoichi Matsuda

雑誌 : Science and Technology of Advanced Materials: Methods

DOI : 10.1080/27660400.2023.2232297

掲載日時 : 2023 年 7 月 20 日 (日本時間) オンライン掲載

用語解説

(1) 材料開発の DX

デジタル技術の利用により材料開発に変革を起こすこと。一般的に DX (デジタルトランスフォーメーション) は、デジタル技術を活用しビジネスモデルや働き方などを根本から変革することを指します。そのため、材料開発の DX では、材料データや機械学習・AI 技術、ロボットの活用による自動実験などを用いて、新しい材料が開発されるプラットフォームそのものを変革することを目指します。

(2) ベイズ最適化手法 (PHYSBO)

材料物性が向上すると期待される材料候補を提案する機械学習手法。NIMS-OS では、高速でスケールアップなベイズ最適化が実施できる Python パッケージ PHYSBO を利用しています。

(3) 無目的探索手法 (BLOX)

材料物性空間で一様に材料が分布するように、次に検討する材料を提案する機械学習手法。材料物性の限界を知るために利用することができます。NIMS-OS では、Python パッケージ BLOX を利用しています。

(4) 相図・状態図用アクティブラーニング手法 (PDC)

少ない実験回数で詳細な相図・状態図を作成するための機械学習手法。新しい相が現れそうな実験候補や、相境界となると予測される実験候補を適切に選定します。NIMS-OS では、Python パッケージ PDC を利用しています。

(5) 電気化学自動実験ロボット (NAREE)

NIMS が 2017 年に独自に開発した、電解質の調査とその電池性能評価を自動で実施するロボット。最大で 96 並列の実験を一度に行うことができます。

(6) Python 言語

インタプリタ型プログラミング言語の一種。Python で利用できる多くの機械学習用ライブラリが配布されています。

(7) GUI

グラフィカルユーザインターフェースのこと。ユーザがコンピュータ画面上で視覚的に、指示を出すことができます。

(8) データ自動蓄積システム RDE

実験室で生まれる研究データをオンラインで登録するために NIMS が開発したシステム。材料データプラットフォーム「DICE」の機能の 1 つであり、登録されたデータは、自動的に再利用可能な形に構造化するための各種処理が施されて保存されます。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

NIMS マテリアル基盤研究センター 材料設計分野 データ駆動型アルゴリズムチーム
チームリーダー 田村亮 (たむらりょう)

E-mail: TAMURA.Ryo@nims.go.jp

TEL: 029-860-4948

URL: https://www.nims.go.jp/group/da/ryo_tamura/tamura_home_j.html

NIMS エネルギー・環境材料研究センター 電池材料分野 電気化学スマートラボチーム
チームリーダー 松田翔一 (まつだしょういち)

E-mail: MATSUDA.Shoichi@nims.go.jp

TEL: 029-860-4637

URL: https://samurai.nims.go.jp/profiles/matsuda_shoichi

(報道・広報に関すること)

NIMS 国際・広報部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp