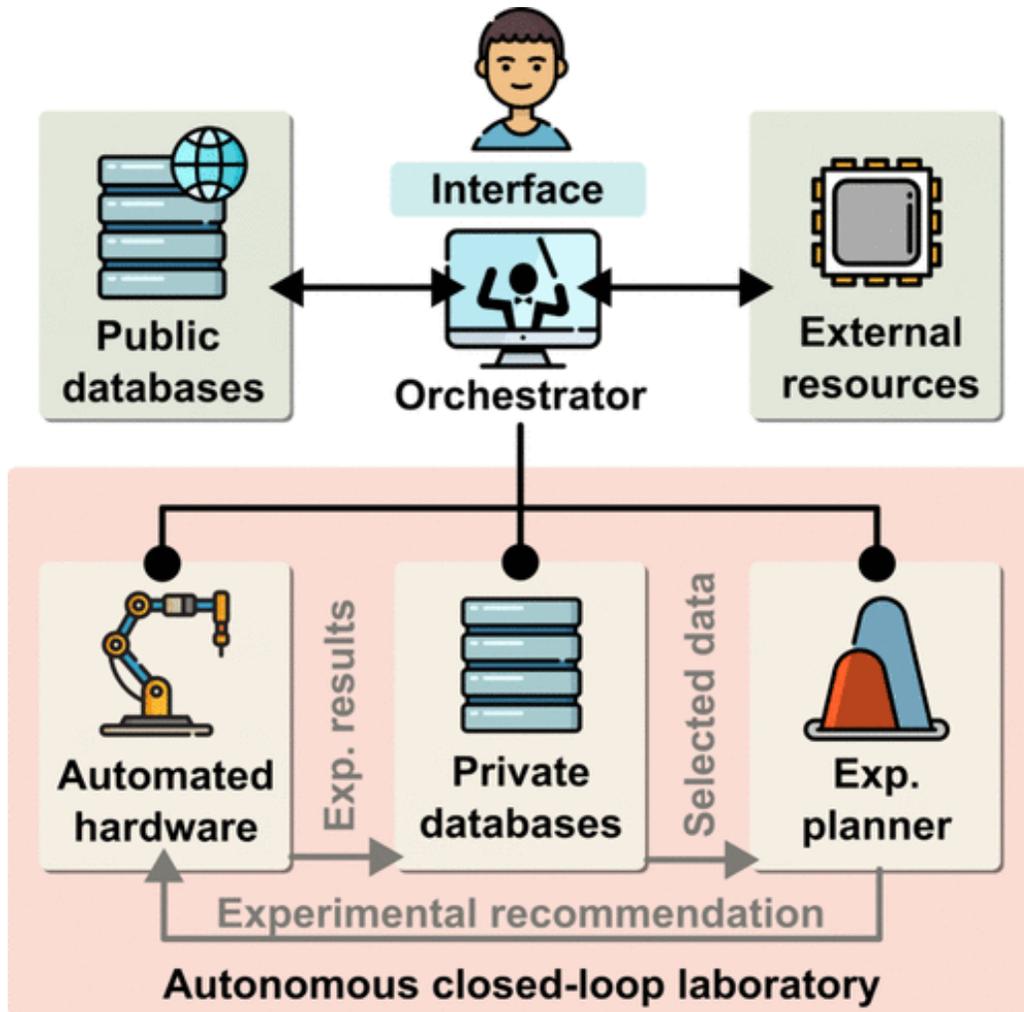


AI_心駆動ラボシステムにおける オーケストレーション

NIMS 田村 亮



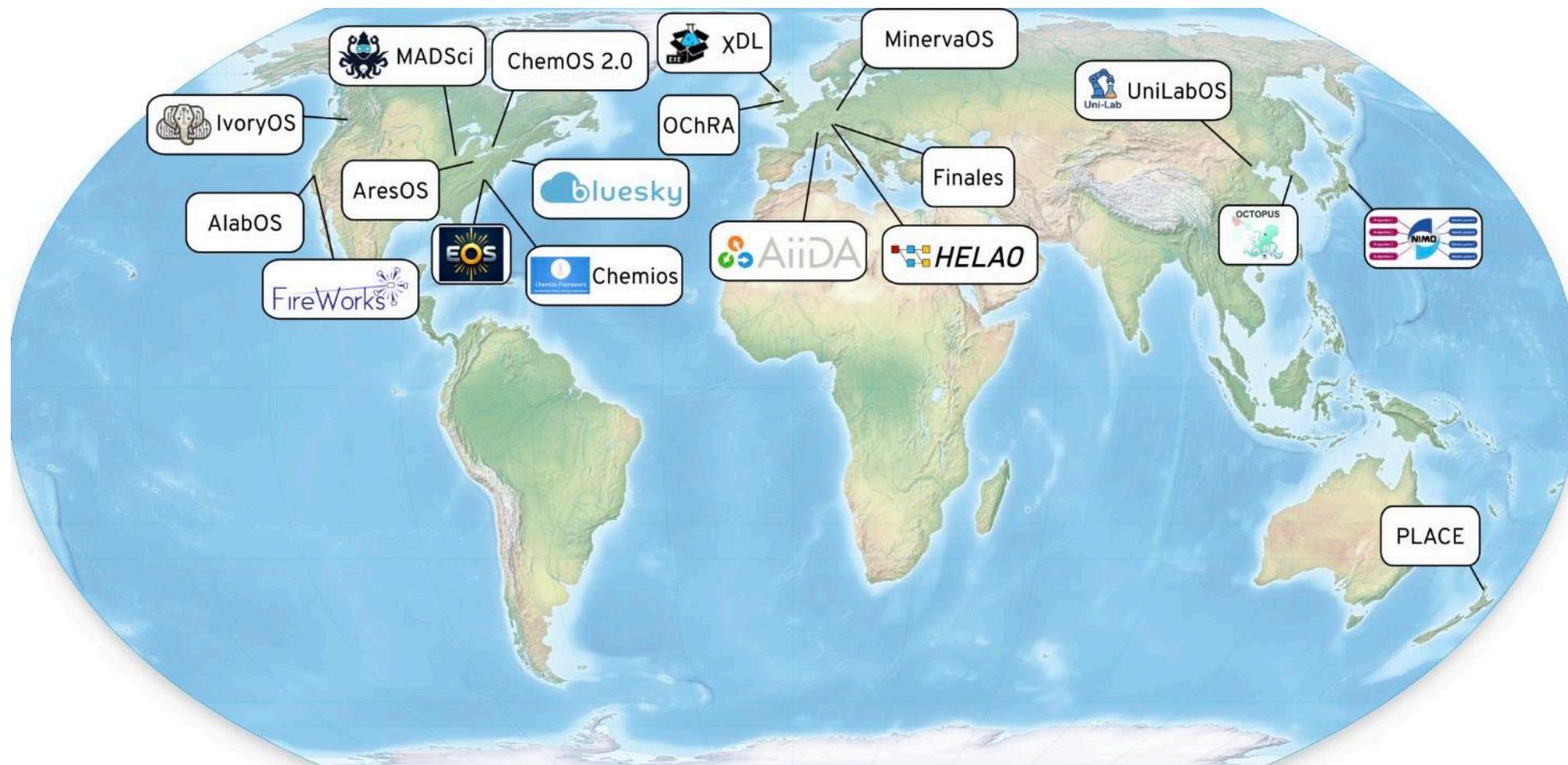
AI駆動ラボシステムをコントロール



実験装置と人工知能の間を繋ぎ、
データ連携、シミュレーション連携、
スケジュールなども考え
クローズドループを形成、
コントロールするための
ソフトウェアが必要！

オーケストレーションソフトウェア
(OS)

世界のOS一覧



Last week, we had a virtual workshop on workflow orchestration for [#SelfDrivingLabs](#). With 11 excellent speakers and around 150 participants, we addressed 3 important topics:

User challenges

Which applications require workflow orchestration? Which challenges do exist? What does the ideal orchestrator look like? What would it enable that current solutions cannot?

The existing landscape

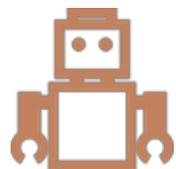
There are plenty of non-commercial orchestration tools out there (see […さらに表示](#))

[翻訳を表示](#)



2026年1月オンライン開催

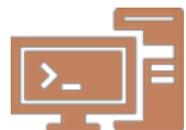
自動自律材料探索用NIMO



ロボット実験:
高速自動化による実験



手動実験:
研究者による手作業実験



シミュレーション:
計算機上でのモデリング

次の実験提案



目的関数の
フィードバック

次の指針を与える
(自律化)



標準搭載アルゴリズム一例

RE
Random sampling. Effective for preparing the initial data.
✓ No training data required

PHYSBO
Conventional Bayesian optimization method. Highly effective for finding the best objective values.
✓ Training data required
✓ Real-valued objectives
✓ Single objective
✓ Multiple objectives

BLOX
Objective free exploration method. Highly effective for gaining a bird's-eye view of the distribution within the property space.
✓ Training data required
✓ Real-valued objectives
✓ Single objective
✓ Multiple objectives

PDC
Phase diagram construction method. Highly effective for rapidly identifying boundaries of categorical objectives, beyond simple phase diagrams.
✓ Training data required
✓ Categorical objective
✓ Single objective

多彩なアルゴリズムで自律化を加速
(自律化のsklearnに！)

オープンソースとして公開中

Developers



Ryo Tamura
LEAD DEVELOPER



Shoichi Matsuda
EXPERIMENTAL
ADVISOR



Naruki
Yoshikawa
SDL DESIGNER



Koji Tsuda
ALGORITHMIC ADVISOR

Web page



GitHub



NIMOが自律化した装置群



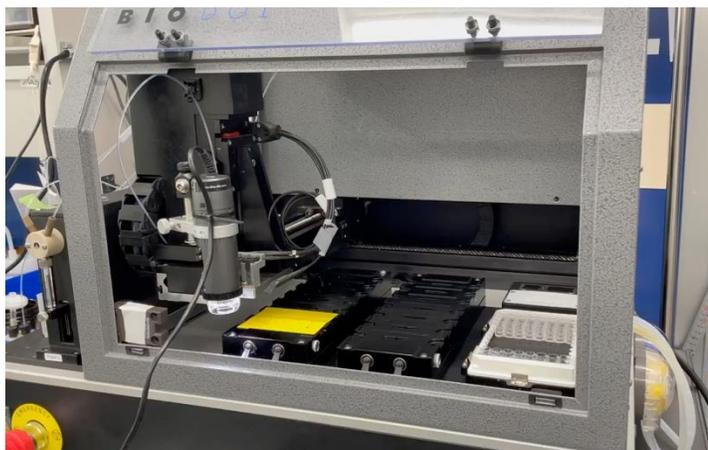
電気化学自動実験装置



化学合成自動実験装置



組成傾斜薄膜実験装置



非接触型自動分注装置



塗布乾燥プロセス実験装置



DxMTにおいても
複数連携進行中

AUTO実験工房  産総研

AISTにおける実験自動化と自律化のための
エコシステム

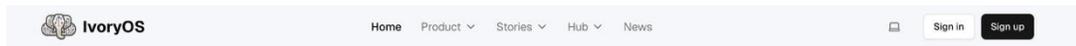
国外OSとの連携



他のOSがNIMOのアルゴリズムを利用



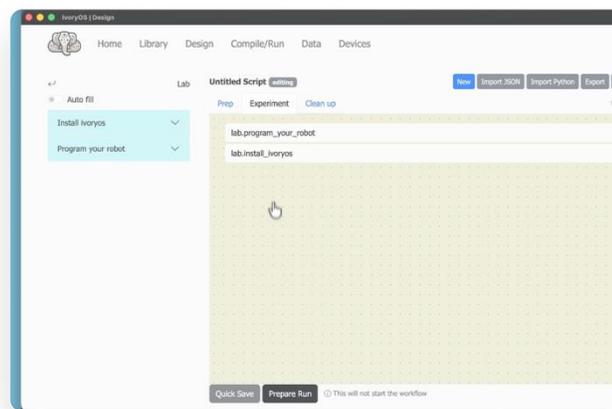
ivoryOS



Automate Without Coding

Science-native autonomous workflows with open source orchestrator and drivers.

IvoryOS Hub (Beta)

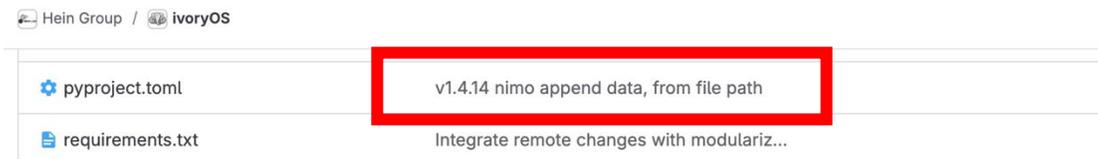


TRUSTED BY OR PARTNERED WITH



ブリティッシュコロンビア大（カナダ）開発
実験操作がPythonで用意できれば、
すぐにwebインターフェースを作成可能

ivoryOSにNIMOが標準搭載



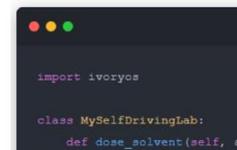
README.md

docs passing pypi v1.5.2 license MIT YouTube tutorial YouTube demo Nature Comm. paper Discord 2 online



IvoryOS: interope

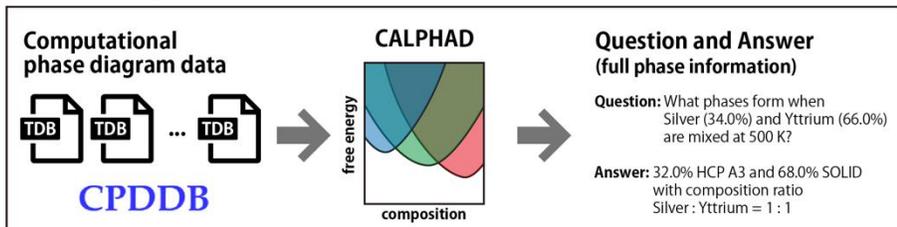
A plug-and-play web interfa



日々蓄積されるデータの利活用例

材料データを学んだLLMの開発

Generating Q&A pairs



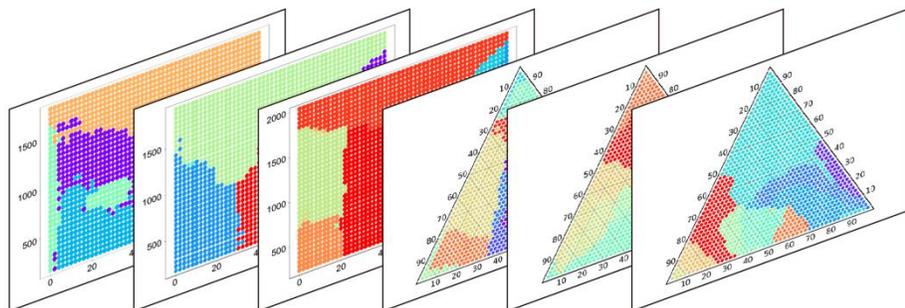
Training LLM

Question
What phases form when Silver (46.0%) and Aluminum (54.0%) are mixed at 900 K?



Answer (phase name)
LIQUID+HCP_A3

Predicting novel phase diagrams



Q&Aの例 (数10万問)

Task	Full phase information	Phase name	Experimental condition
Instruction	You are an expert in phase diagrams, thermodynamics, and materials science, specializing in alloy systems.		
Question (Input)	What phases form when Silver (34%) + Yttrium (66%) are mixed at 500 K?	What phases form when Silver (34%) + Yttrium (66%) are mixed at 500 K? Answer phase names only.	Under what condition do Silver + Yttrium form HCP_A3 + SOLID?
Answer (Output)	32% HCP_A3 + 68% SOLID with composition ratio Silver : Yttrium = 1 : 1.	HCP_A3 + SOLID.	Silver (34%) + Yttrium (66%) mixed at 500 K.

材料
データ



材料特化
LLM



MCP
サーバー

AIから自然言語で利用
AIが利用できるデータベース

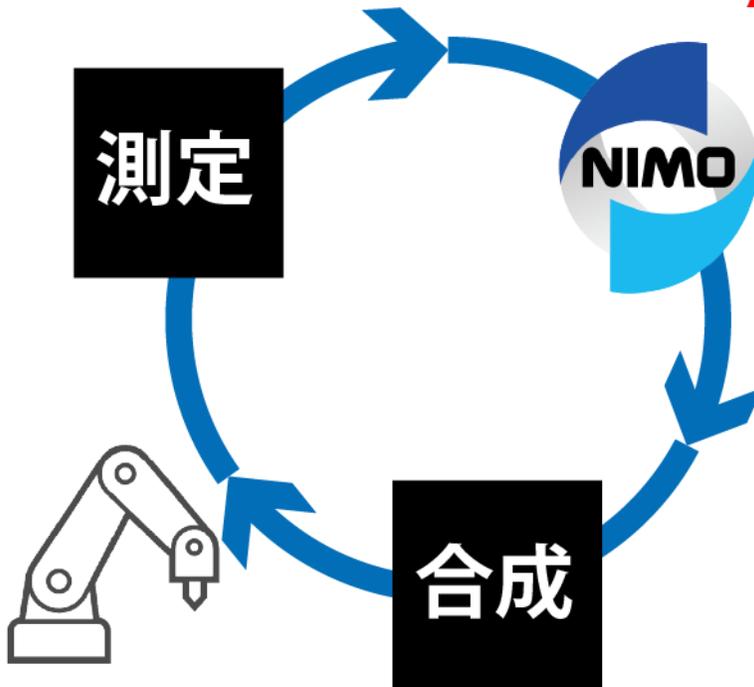
AI駆動ラボの未来



小さい空間の
材料探索ループ
使用できる試薬・
元素が制限

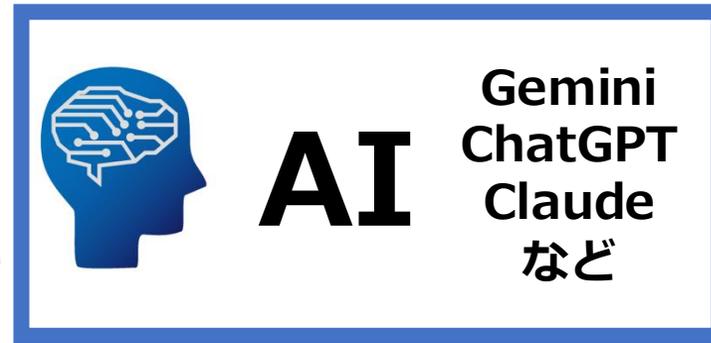
大きい空間の材料探索ループ
小さい材料探索ループの
方針を決める

AIが使える
材料ツール群



結果報告

次回方針



- 材料特化LLM 1
- 材料特化LLM 2
- 基盤モデル 1
- 基盤モデル 2
- 計算ツール 1
- 計算ツール 2



↑ ↓
スパコン
量子計算機

