

Back Number

本論文は

世界経済評論 2024 年 7/8 月号

(2024 年 7 月発行)

掲載の記事です



世界経済評論

定期購読のご案内

年間購読料

1,320円×6冊=7,920円

6,600円

税込

17%
送料無料
OFF

富士山マガジンサービス限定特典

※通巻682号以降

定期購読
期間中

デジタル版バックナンバー読み放題!!



世界経済評論 定期購読



0120-223-223

[24時間・年中無休]

お支払い方法

Webでお申込みの場合はクレジットカード・銀行振込・コンビニ払いからお選びいただけます。
お電話でお申込みの場合は銀行振込・コンビニ払いのみとなります。

Fujisan.co.jp

雑誌のオンライン書店

生成AIで探す新規物質開発の信頼度は10% 以下?



鶴岡 秀志

はじめに

理系学術論文の掲載内容のうち半数以上が第三者によって再現できない、場合によっては論文を執筆した当事者グループも再現できないという理工系以外の方にとっては驚くべき事実がある。裏返せば、時折メディアで話題になる「新発見」「発明」の半数以上は第三者による再現性確認がされずに報道されているので実現性に乏しい。学者仲間では Nature 誌に掲載された内容の再現性の低さが内輪話として度々取り上げられるので、特に Nature 大好き日本のマスコミ報道は人々の科学への理解を歪める恐れがある。再現性の無さの典型が2014年に「世紀の大発見」として報じられたものの虚報であった理化学研究所の「STAP細胞」事件である。本稿ではこの事件を取り上げるのではなく、2005年のJ.P.A.IoannidisのEssay (J.P.A.Ioannidis, PLOS Medicine, 2(8) e124 (2005))とM. Baker (M. Baker, Nature 533, 454 (2016))の報告を元に、生成AIの土台となっているにもかかわらず疑問が生じている論文の信頼性について触れたい。

化学者の約90%が論文掲載内容を再現できなかった!

Bakerの調査によると、化学者の約90%、生物学者の約80%、物理学者、エンジニア、医学者の約70%が論文掲載内容を再現できなかったと回答していると報告した。これはとんでもない数字である。特に、化学反応操作を統一した書式ルールで記載することが義務付けられている化学系論文誌の信頼性が極端に低いことである。この統一書式があるので、一般的に化学系論文誌、例えば American Chemical Society の発行する主要論文誌に記載されていることは「正しい」と多くの研究者が信じていた。ところがその化学系研究

者が最も論文報告内容を疑っているのである。なお、このような統一された書式は他の分野ではかなり緩く、薬品や器具などを製品名(不純物や改良変更点が不明)で記載するなど徹底されていない。

筆者も応用化学出身、化学工学専攻なので化学反応の報告では薬品の供給元と組成に加えて、気象条件、実験場所、器具のメーカーと事前準備方法(器具洗浄に使用した洗剤種類も記載)、取り扱い手順、分析方法などの記載ルールを教え込まれた。学部時代の専門必修実験では教則本通りに行えば変な結果にはならないが、しばしば準備段階の手抜きにより異常な結果になり、かえってレポート作成に苦勞することになる。化学工学は物質をマクロ的(少なくとも数百グラム単位)に扱うので微細な反応や不純物の影響がマスに埋もれてしまうので教則本通りに行えばその通りになるのであるが、例えば低気圧の影響で水の沸点が低下することにより実験そのものがうまくいかなかったりする。それでも化学工学便覧に記載されている内容は再現性が確認されているので信用できる。

化学系実験の再現性が得られない最大の理由は実験者の基礎知識とテクニック、すなわち技量の拙さである。化学実験の技量不足で実験の下手な学生はどここの国でも存在するが、特に中国の研究者は準備や装置操作を補助員に丸投げしている場合が多く、研究者本人の技量が十分養われていないので西側諸国の研究所でも悩みの種になっている。G7と欧州の主要大学では実験をサポートする「ゴッドファーザー」的な技術員が必ず在籍し、キャンパス周辺の工房に「神の手」を有する職人がいるので学生実験だけではなく先端研究でも欠かせない存在となっている。また、各研究室

では博士課程学生やポスドクが新人の訓練と指導をしてくれる。そのため、「新発見」が単なる操作の誤りか否かの判断も的確なので、前述の理研の「STAP 細胞」事件の様なことは稀であった。

学術研究を信頼できなくなったのか？

Ioannidis 氏は主に生化学分野の研究者なので、この分野について統計的に問題の発生理由を説明している。この内容説明はかなり煩雑なので紙幅の都合上省略するが、読者のごく身近にあることから学術論文執筆のための実験研究の厳密さを示したい。

1 気圧 (1013.25 ヘクトパスカル) の状態では水は絶対温度 373 K (100℃) で沸騰すると習う。しかし、鍋で水を沸かすと 60℃ ぐらいからポツポツと泡が立ち始める。このため、工業操作、特に閉管内の水を加熱するときは 85℃ を超えたら急に沸騰して配管設備を破壊する可能性があることを念頭において設計と運転を行う。100℃ で沸騰する水とは気体や他の物質が溶け込んでいない超純水である。通常の水は空気の成分だけではなく色々な微量成分が溶け込んでいる。研究室に配属されてくる学生は、しばしば購入した容器に入っている「純水」、あるいは製造器から得られた純水をそのまま使おうとする。化学反応実験を行う際は少なくとも純水の「脱気」処理と微量成分除去処理を行い電気伝導度計で規定の数値以下になったことを確認して使用しなければならない(この超純水は不味い)。水はすぐに気体を吸収するので実験開始までの保管も面倒であるが、この様な時間と労力を必要とする準備を省略してしまうことで「新発見」「再現できない」ことが頻発する。

水以外の薬品も実験の目的や条件に応じて不純物の除去や結晶構造を変化させたりしなければならない。逆に「調合」した化学薬品を用いることによってしか得られない化学反応も存在する。論

文に記載されている「調合された試薬」によっては、その研究者、研究室で特別調整されたものが使われている場合があり、その試薬を作ることから始めなければならない場合がある。かつてユニリーバの英国中央研究所に在籍した際に、ISO に掲載されている反応マーカー試薬が、実はユニリーバしか保有していないものであったことを知って驚いたことがあった。この様なことは欧州化学メーカーでは普通に行われていて、研究開発や品質管理の障壁になっていた。研究はクッキングのように既製品を購入してできるものではないのだ。

生成 AI は既存の情報で動いている

AI は労働集約的要素を全く考慮せずにプログラムが構築されるので、計算結果が現実とそぐわないことが度々発生する。そのため、発信力の有る組織が常識を堅持しないと馬鹿げた AI 結果が氾濫する恐れがある。誤解の多い例として、エタノールと水の混合物は「共沸」という現象により重量比率で 95% を超えることができない。新型コロナの流行時に 100% エタノールという表現がメディアで溢れて、専門家がたびたび「消毒用アルコールは 70~95% です」と注意していたことを覚えている方も多いと思う。2023 年に一般社会に衝撃を与えた生成 AI は、WEB に存在する情報を集約して出力するシステムである。生成 AI で新規化学合成を加速するという報道は多々あるものの、その土台となる研究成果の再現性が前述の様に惨憺たる状況なので、使い物になる生成 AI 出力結果はかなり低い割合ということになる。

IT 技術が全知全能であることを喧伝する知識人が急増しているが、経済財政に関わる方々にも科学研究の難しさと不確実性を理解した上でお金を有効に活用していただきたい。

つるおか しゅうじ 元信州大学先鋭研究所特任教授