

「ブラックボックス」と「ホワイトボックス」



朝 日 剛

2024 年度中国四国支部長を仰せつかっております朝日剛です。昨年に引き続き本誌「とびら」を書く機会をいただきましたので、稚拙ながら最近思ったことを書かせていただきます。

表題のふたつの語句の対比は近年 AI 分野等によく見かけるものです。AI では、機械学習やディープラーニングにより大量データから自動で特徴を見つけ、ある入力に対して予測値を出力します。画像・音声認識や株式売買等で実用化されています。しかし、予測値である出力結果に至る根拠が明確でなく「ブラックボックス」化されています。そこで注目されているのが、結果に至る判断根拠がわかる説明可能な AI、すなわち「ホワイトボックス」化ということのようです。さて、この「ブラックボックス」と「ホワイトボックス」の対比を機器分析にあてはめてみると、AI の場合とは質的に全く異なりますが、何か考えさせられるものがありました。

元来、ほとんどの機器分析装置はホワイトボックス型です。データ計測からその後のデータ処理と結果の出力まで明確です。ところが、近年の装置の高度化・精密化とコンピュータによるデータの自動処理化によって、専門知識のないユーザーにとっては、装置の「ブラックボックス」化が進んでいるようです。誰もが知っている吸収分光光度計を例に考えてみます。この装置は、試料溶液をセットすると光の透過率が計測されそのデータをもとに吸光度が出力されます。当然ですが試料は透明で濁りがあってはいけませんし、吸光度が3以上ではその値の定量性はほとんどありません。こうしたことは装置マニュアルに書いてはありますが、一般ユーザーがそれを無視して使用すると、間違った分析結果をもとに誤った結論に至りかねません。使用法が適切でないと片づけることも可能ですが、一方で、中身を知る必要のない装置、すなわち「ブラックボックス」化こそが求められていると、個人的には考える次第です。例えば「スマホ」ですが、アプリを含め本体の動作原理など知らなくても非常に便利です。具体的にどんな分析機器の開発が可能かのアイデアは私にはありませんが、こうした視点もこれからの分析化学（科学）分野において重要が増すと思う次第です。

最後になりましたが、来年の第 85 回分析化学討論会は愛媛県松山市にて、5 月 31 日、6 月 1 日の日程で開催します。今年改修され新しくなった道後温泉そしておいしい料理も楽しみにして頂き、多くの方々の討論会へのご参加をお待ちしております。

〔ASAHI Tsuyoshi, 愛媛大学大学院理工学研究科, 中国四国支部長〕