

Съест ли ИИ квантовый компьютер на обед

Эдд Гент

Быстрое развитие применения искусственного интеллекта (ИИ) в моделировании физических и химических процессов заставляет задуматься: действительно ли так нужны квантовые компьютеры?

Технологические компании вкладывают миллиарды долларов в квантовые вычисления несмотря на то, что до практического применения этой технологии ещё далековато. Так для чего же будут использоваться квантовые компьютеры будущего, и почему так много экспертов убеждены, что они изменят правила игры? Создание компьютера, использующего необычные свойства квантовой механики, является идеей, которая обсуждается с 1980-х годов. Но за последние пару десятилетий учёные добились значительных успехов в создании крупномасштабных устройств. Теперь множество технологических гигантов от Google до IBM, а также несколько хорошо финансируемых стартапов инвестировали значительные суммы в эту технологию и создали несколько отдельных машин и квантовых процессоров (QPU). Теоретически квантовые компьютеры могут решать задачи, которые выходят за рамки даже самого мощного классического компьютера. Тем не менее существует широкий консенсус в отношении того, что такие устройства должны стать намного больше и надёжнее, прежде чем это произойдёт. И, как только они это сделают, есть надежда, что технология решит множество неразрешимых в настоящее время проблем в химии, физике, материаловедении и даже машинном обучении. Квантовые компьютеры обладают огромным потенциалом, и многие эксперты уверены, что они кардинально изменят способы решения сложных задач в различных областях науки и технологий. Давайте разберёмся, зачем вкладываются такие огромные средства в эту технологию и каким образом квантовые компьютеры могут изменить правила игры.

Что в них такого?

Идея создания компьютера, основанного на квантовой механике, воз-

никла ещё в 1980-е годы, но только в последние десятилетия учёные смогли добиться значительных успехов в создании первых прототипов. Сейчас такие компании, как Google, IBM и другие стартапы, активно инвестируют в эту технологию, создавая отдельные квантовые процессоры (QPU). Основное преимущество квантовых компьютеров заключается в их способности решать задачи, которые неподвластны даже самым мощным классическим суперкомпьютерам. Они используют уникальные принципы квантовой механики, такие как суперпозиция и запутанность, чтобы параллельно обрабатывать огромные объёмы данных, что теоретически ускоряет вычисления на несколько порядков.

Что они могут?

Существует ряд задач, которые квантовые компьютеры могут решить быстрее и точнее, чем классические компьютеры. Вот несколько примеров.

- **Оптимизация и симуляция сложных систем.** Квантовые компьютеры могут ускорить процессы оптимизации, необходимые в логистике, финансовом планировании и управлении цепочками поставок. Также они могут помогать в моделировании поведения сложных систем, таких как погодные условия или молекулярные взаимодействия.
- **Фармакология и медицина.** Квантовые компьютеры могут ускорять разработку новых лекарств, позволяя проводить моделирование химических реакций и биологических процессов на уровне атомов и молекул.
- **Материалы высокого качества.** Квантовые компьютеры помогут создавать новые материалы с заданными свойствами, что полезно в таких областях, как энергетика, авиация и строительство.

● Безопасность и криптография.

Один из ярких примеров применения квантовых компьютеров – это взлом квантовых шифров, что позволит создать новые, более безопасные криптографические системы.

Стоят ли они таких усилий?

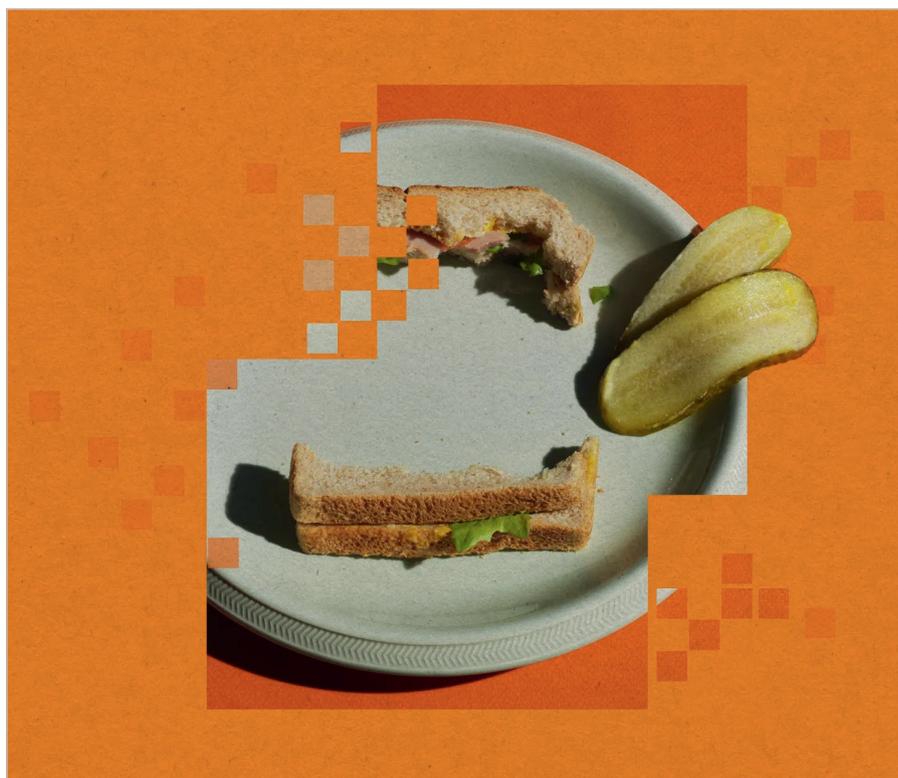
Несмотря на то что до широкого внедрения квантовых компьютеров ещё далеко, технологические компании продолжают активно вкладывать деньги в эту сферу. Причина проста: квантовые компьютеры потенциально открывают двери к решению задач, которые до сих пор считались неразрешимыми. Даже если на практике это займёт десятилетия, успех может привести к прорыву в различных областях, что сделает такие инвестиции крайне выгодными. На протяжении многих лет технологические гиганты инвестировали миллиарды долларов в создание квантовых компьютеров, надеясь, что они произведут революцию в таких отраслях, как финансы, фармацевтика и логистика. Эти надежды особенно сильны в физике и химии, где квантовая механика играет ключевую роль. Здесь квантовые машины потенциально способны значительно превзойти традиционные компьютеры. Однако пока разработчики квантовых устройств сталкиваются с многочисленными техническими вызовами, другой игрок демонстрирует впечатляющие результаты в тех самых перспективных направлениях.

Сегодня искусственный интеллект активно используется в фундаментальных исследованиях физики, химии и материаловедения, ставя под сомнение уникальность роли квантовых вычислений. Джузеппе Карлео, профессор вычислительной физики Швейцарского федерального технологического института (EPFL), отмечает стремительное развитие возможностей ИИ в моделировании квантовых систем. Недавно он стал соавтором статьи в журнале *Science*, демонстрирующей, что методы на основе нейронных сетей становятся основным инстру-

ментом для исследования материалов с выраженными квантовыми эффектами. Кроме того, компания Meta представила новую модель ИИ, обученную на большом массиве данных о материалах, которая заняла лидирующие позиции в рейтинге подходов машинного обучения для поиска новых веществ. Учитывая последние достижения, учёные начинают задаваться вопросом: сможет ли ИИ решить большинство значимых задач в химии и материаловедении ещё до того, как квантовые компьютеры выйдут на уровень промышленной эксплуатации. «Появление новых конкурентов в сфере машинного обучения ставит под угрозу будущие приложения квантовых компьютеров, – утверждает Карлео. – Я считаю, что компании, вложившие средства в квантовые разработки, вскоре осознают, что их инвестиции не оправдались».

Преодоление трудностей

Основным элементом квантового компьютера является кубит – квантовый аналог бита в классическом компьютере. Отличие заключается в том, что кубит может находиться в промежуточном состоянии, представляя одновременно как 0, так и 1, что называется суперпозицией. Эта уникальная особенность позволяет квантовым компьютерам выполнять операции с невероятной скоростью и эффективностью. Кубиты могут быть реализованы на различных устройствах, таких как сверхпроводники, захваченные ионы или даже фотоны (частицы света). Современные квантовые компьютеры уже достигли отметки в 1000 кубитов, но большинство из них содержат всего несколько десятков или сотен кубитов. Эти устройства гораздо более уязвимы к внешним помехам, чем классические компьютеры, из-за высокой чувствительности квантовых состояний к изменениям окружающей среды, таким как колебания температуры или электромагнитные поля. Это затрудняет выполнение длинных квантовых программ, необходимых для решения практических задач. Однако это не означает, что сегодняшние квантовые компьютеры бесполезны, отметил Уильям Оливер, директор Центра квантовой инженерии в Массачусетском технологическом институте (MIT) в США. «Сейчас квантовые компьютеры в основном используются для того, чтобы нау-



читься строить квантовые компьютеры большего масштаба, а также для освоения методов работы с ними», – объяснил он в интервью Live Science. Разработка более крупных квантовых процессоров помогает понять, как создавать более мощные и стабильные квантовые машины, а также предоставляет платформу для разработки и тестирования новых квантовых алгоритмов. Они также позволяют исследователям проверять различные схемы квантовой коррекции ошибок, которые будут критичны для раскрытия полного потенциала этой технологии. Эти схемы часто включают распределение квантовой информации между несколькими физическими кубитами для формирования одного «логического кубита», который гораздо более устойчив к ошибкам. Люткенхаус, исполнительный директор Института квантовых вычислений в Университете Ватерлоо в Канаде, подчеркнул, что недавние достижения в этой области указывают на то, что отказоустойчивые квантовые вычисления могут быть ближе, чем кажется. Несколько компаний, включая QuEra, Quantinuum и Google, недавно продемонстрировали способность создавать логические кубиты с высокой надёжностью. Увеличение числа кубитов до тысяч или даже миллионов, необходимых для решения практических задач, займёт время и потребует зна-

чительных инженерных усилий, добавил Люткенхаус. Но как только это будет достигнуто, откроется множество захватывающих возможностей для применения.

Сложные расчёты

Основной потенциал квантовых компьютеров кроется в их способности выполнять определённые виды вычислений значительно быстрее, чем это возможно на традиционных машинах. Чтобы достичь этой цели, необходимы квантовые процессоры, намного превосходящие по мощности существующие. Хотя самые продвинутые устройства уже насчитывают около тысячи кубитов, для значительного превосходства над классическими системами, потребуется, вероятно, десятки тысяч, а то и миллионы кубитов. Когда такое оборудование появится, квантовые алгоритмы вроде алгоритма Шора смогут решать задачи экспоненциальной сложности гораздо эффективнее, чем классические аналоги. Тем не менее для большинства квантовых алгоритмов с явными коммерческими перспективами, таких как поиск в базах данных, оптимизация решений или применение методов искусственного интеллекта, скорость вычислений возрастает не так существенно. Более того, в недавней работе, подготовленной совместно с руководителем отде-

ла квантовых вычислений Microsoft Маттиасом Тройером, отмечается, что даже эти теоретические преимущества могут испаряться, учитывая, что квантовое оборудование функционирует на порядок медленнее современных компьютерных чипов. Дополнительную проблему представляет передача значительных объёмов классических данных в квантовую систему и обратно, что усложняет использование квантовых компьютеров в реальных условиях. Исходя из этого, Тройер и его команда делают вывод, что квантовые компьютеры должны сосредоточиться на задачах в химии и материаловедении, требующих моделирования систем, управляемых квантовыми эффектами. Ведь компьютер, работающий по тем же законам квантовой механики, что и исследуемая система, обладает естественным преимуществом. Именно эта идея лежала в основе концепции квантовых вычислений с момента её зарождения благодаря известному физическому Ричарду Фейнману. Многие явления, представляющие огромный научный и экономический интерес, такие как поведение белков, молекулярная структура лекарственных препаратов и свойства материалов, подчиняются правилам квантовой механики. Их характеристики зависят от взаимодействия элементарных частиц, прежде всего электронов, поэтому точное моделирование этих взаимодействий могло бы дать возможность прогнозировать свойства молекул. Это открывает путь к открытию новых лекарств, созданию более эффективных аккумуляторов и другим важным научным прорывам.

Но квантовая механика, со своими парадоксальными правилами, особенно явление квантовой запутанности, которое связывает состояния удалённых частиц, делает взаимодействие частиц крайне сложным. Точная оценка таких взаимодействий требует сложных математических расчётов, сложность которых растёт экспоненциально с увеличением числа частиц. Это делает моделирование больших квантовых систем практически невозможным на классических компьютерах. Здесь на сцену выходят квантовые компьютеры. Работая на тех же квантовых принципах, они могут эффективно представлять квантовые состояния, что недоступно традиционным машинам. Более того, они способны использовать квантовые эффекты для

ускорения вычислений. Однако не все квантовые системы одинаково сложны. Степень их сложности зависит от силы взаимодействия или корреляции между частицами. В системах с сильными взаимодействиями учёт всех этих связей резко увеличивает объём вычислений, необходимых для моделирования. Тем не менее в большинстве систем, представляющих практический интерес для химиков и материаловедов, взаимодействие частиц слабое, объясняет Карлео. Это значит, что частицы мало влияют на поведение друг друга, что значительно упрощает моделирование. Поэтому, по мнению Карлео, квантовые компьютеры вряд ли принесут значительное преимущество для решения большинства задач в химии и материаловедении. Уже существуют классические методы, способные точно моделировать слабосвязанные системы, самым известным из которых является теория функционала плотности (DFT). Основной принцип DFT состоит в том, что для понимания ключевых характеристик системы достаточно знать электронную плотность – распределение электронов в пространстве. Этот подход сильно упрощает вычисления, сохраняя высокую точность для слабосвязанных систем.

Моделирование больших систем с применением таких методов требует значительной вычислительной мощности. Однако за последние годы произошёл всплеск исследований, использующих DFT для анализа химических соединений, биомолекул и материалов. Получаемые данные затем используются для обучения нейронных сетей. Эти модели искусственного интеллекта выявляют закономерности в данных, позволяющие предсказывать свойства конкретных химических структур. При этом они на порядки дешевле в исполнении, чем стандартные расчёты DFT. Этот подход позволил значительно увеличить размеры систем, которые можно моделировать, – до 100 000 атомов одновременно, а также продолжительность самого моделирования, рассказывает Александр Ткаченко, профессор физики Университета Люксембурга. «Это потрясающе, – отмечает он. – Теперь вы действительно можете охватить большую часть химии». По словам Александра Исаева, профессора химии Университета Карнеги-Меллон, подобные методы уже

находят широкое применение в химической промышленности и науках о жизни. Ранее недоступные задачи, такие как оптимизация химических реакций, разработка новых материалов для аккумуляторов и изучение связывания белков, теперь становятся выполнимыми.

Как и в большинстве приложений искусственного интеллекта, основной ограничивающий фактор – это данные, подчёркивает Исаев. Недавно опубликованная компанией Meta база данных о материалах содержала результаты расчётов теории функционала плотности (DFT) для 118 миллионов молекул. Обученная на этих данных модель продемонстрировала выдающиеся результаты, однако создание обучающей выборки потребовало колоссальных вычислительных ресурсов, значительно превышающих возможности большинства исследовательских групп. Это указывает на то, что для полной реализации потенциала данного подхода потребуются значительные инвестиции. Тем не менее моделирование слабо коррелированных систем с использованием DFT не сталкивается с проблемой экспоненциального роста сложности, поясняет Ткаченко. Это означает, что при наличии достаточного количества данных и вычислительных мощностей классические подходы на базе ИИ могут успешно справляться даже с самыми крупными системами. Учитывая, что появление квантовых компьютеров достаточной мощности ожидается лишь через несколько десятилетий, текущие тенденции развития ИИ предполагают, что он способен достичь важных целей, таких как точное моделирование взаимодействия лекарств с белками, значительно раньше.

Моделирование

При моделировании сильно коррелированных квантовых систем, где частицы интенсивно взаимодействуют, методы вроде теории функционала плотности (DFT) быстро теряют свою эффективность. Хотя такие системы встречаются реже, они включают материалы с потенциально революционными свойствами, такими как высокотемпературная сверхпроводимость или сверхчувствительные сенсоры. Даже в этих случаях искусственный интеллект демонстрирует значительный прогресс. В 2017 году

Джузеппе Карлео из EPFL и Маттиас Тройер из Microsoft опубликовали пионерскую работу в журнале *Science*, доказав, что нейронные сети способны моделировать сильно коррелированные квантовые системы. Подход отличается от традиционного обучения на данных. По словам Карлео, он напоминает стратегию AlphaZero от DeepMind, которая научилась играть в го, шахматы и сёги (разновидность японской настольной игры, которая произошла от распространения на Ближнем Востоке арабского варианта шахмат), опираясь исключительно на правила игр и способность играть против самой себя. В данном случае правила игры диктуются уравнением Шрёдингера, которое точно описывает квантовое состояние системы, или волновую функцию. Модель размещает частицы в разных конфигурациях и измеряет энергию системы. Задача состоит в достижении минимальной энергетической конфигурации (так называемого основного состояния), определяющей свойства системы. Процесс повторяется до тех пор, пока энергия не стабилизируется, что сигнализирует о достижении основного состояния или близкого к нему.

Карлео подчёркивает, что сила этих моделей заключается в их способности сжатия информации. «Волновая функция – чрезвычайно сложное математическое образование, – объясняет он. – Но было доказано, что нейронная сеть способна уловить всю сложность этого объекта таким образом, что его можно обработать на обычной машине». С момента публикации статьи 2017 года этот подход был расширен на множество сильно коррелированных систем, и результаты оказались весьма обнадеживающими, сообщает Карлео. В статье, вышедшей в журнале *Science* месяц назад, он и его коллеги проверили ведущие методы классического моделирования на сложных задачах квантового моделирования, создав эталон для оценки достижений как в классических, так и в квантовых подходах. Карлео утверждает, что методы, основанные на нейронных сетях, сейчас являются наилучшими для моделирования множества самых сложных квантовых систем, которые они тестировали. «Машинное обучение действительно занимает центральное место в решении многих из этих задач», – комментирует он.

Эти методы привлекли внимание крупных игроков в технологической

индустрии. В августе исследователи из DeepMind представили в журнале *Science* статью, в которой продемонстрировано точное моделирование возбуждённых состояний в квантовых системах, что однажды может помочь предсказывать поведение солнечных батарей, датчиков и лазеров. Команда Microsoft Research также разработала пакет программного обеспечения с открытым исходным кодом, чтобы облегчить исследователям использование нейронных сетей для моделирования. «Одним из важнейших преимуществ этого подхода является то, что он использует огромные инвестиции в программные и аппаратные ресурсы для ИИ», – отмечает Филиппо Вичентини, профессор искусственного интеллекта и физики конденсированного состояния в Политехнической школе во Франции, также участвовавший в сравнительном анализе, опубликованном в *Science*. «Использование этих технологических достижений даёт нам большое преимущество», – добавляет он. Однако стоит отметить, что поскольку основные состояния находятся методом проб и ошибок, а не посредством точных расчётов, они представляют собой лишь приближения. Именно это, по словам Хуана Карраскилья, исследователя из ETH Zurich и одного из авторов сравнительного анализа в *Science*, делает этот подход столь полезным.

Для точного учёта всех взаимодействий в сильно коррелированной системе требуется экспоненциально возрастающее по мере увеличения размера системы количество вычислений. Но если приемлемо получить не абсолютно, но достаточно точный результат, появляется возможность сократить путь. «Может быть, нет надежды полностью точно воспроизвести его, – признаёт Карраскилья. – Но есть шанс собрать достаточное количество информации, чтобы охватить все интересующие нас аспекты. И если нам это удастся, то это будет практически неотличимо от настоящего решения».

Несмотря на то, что сильно коррелированные системы обычно трудно моделировать классическим способом, бывают исключения. Например, некоторые системы, относящиеся к моделированию высокотемпературной сверхпроводимости, как указано в статье 2023 года в *Nature Communications*. «Из-за экспоненциальной сложности

всегда найдутся задачи, для которых невозможно найти короткого пути, – говорит Фрэнк Ноэ, руководитель исследовательской группы в Microsoft Research, занимающейся этими вопросами. – Но я полагаю, что количество таких систем, для которых нельзя найти хорошего короткого пути, значительно сократится».

Новые горизонты квантовых вычислений

Помимо уже упомянутых областей, квантовые компьютеры могут предложить новые интересные возможности.

Оптимизация – одна из ключевых сфер, где квантовые компьютеры могут показать своё преимущество. Такие задачи, как управление транспортными потоками в городах или определение оптимальных маршрутов для логистических компаний, могут быть решены с использованием квантовых алгоритмов. Оптимизация финансовых портфелей также может стать одним из направлений, где квантовые вычисления проявят себя.

Машинное обучение – ещё одно направление, где квантовые компьютеры могут сыграть главную роль. Алгоритмы квантовых вычислений могут помочь в обработке больших объёмов данных для выявления скрытых закономерностей.

Важно помнить, что в этих областях квантовые преимущества могут быть небольшими, и для их реализации на практике потребуется преодолеть серьёзные технические барьеры. Тем не менее прогресс в квантовых алгоритмах стимулирует инновации в классических вычислениях. Разработчики квантовых алгоритмов создают новые методы оптимизации, а специалисты в области компьютерных наук улучшают свои собственные алгоритмы, стирая разницу в эффективности.

Другие направления исследований включают использование квантовых компьютеров для поиска в больших базах данных, что может быть полезным для работы с большими наборами информации. Однако здесь возникают дополнительные сложности, связанные с преобразованием классических данных в квантовые состояния, что замедляет весь процесс и снижает вычислительные преимущества.

Однако на сегодняшний день большинство квантовых алгоритмов предлагают лишь небольшое ускорение по сравнению с классическими метода-

ми. Квантовые устройства работают медленнее, чем электронные схемы на основе транзисторов, и эти небольшие преимущества могут легко исчезнуть при практической реализации.

Несмотря на имеющиеся трудности, есть мнение, что область квантовых вычислений будет развиваться и открывать новые возможности. Уильям Оливер отметил, что для максимального использования потенциала квантовых компьютеров необходимо продолжать исследование и разработку базовых строительных блоков квантовых алгоритмов – элементарных математических операций, которые можно объединять для решения более сложных задач. «Наша цель – разработать квантовые алгоритмы, определить, какие примитивы полезны, а затем комбинировать их для создания новых алгоритмов», – сказал Оливер. Люткенхаус также подчеркнул важность гибкости в подходе к инвестициям в квантовые технологии. «Не фокусируйтесь слишком рано на конкретных задачах, – советует он. – Нам предстоит решить множество общих проблем, и это даст начало множеству новых приложений». Эти рекомендации помогают компаниям ориентироваться в стратегиях развития квантовых вычислений, делая акцент на фундаментальных исследованиях и открытых возможностях для будущих приложений.

Состоится ли волшебство?

Тем не менее Стефани Чишек, доцент физики в Университете Оттавы, предупреждает, что предсказать, какие задачи смогут решить нейронные сети, бывает непросто. В некоторых сложных системах они демонстрируют отличные результаты, тогда как в других, казалось бы, простых ситуациях, вычислительная нагрузка внезапно резко возрастает. «Мы на самом деле не понимаем их ограничения, – говорит она. – Никто пока не знает, при каких условиях системы становятся трудно представимыми с помощью этих нейронных сетей». Между тем значительные успехи были достигнуты и в других классических методах квантового моделирования, отмечает Антуан Жорж, директор Центра вычислительной квантовой физики Института Флэтайрона в Нью-Йорке, также принимавший участие в недавнем сравнительном исследовании в *Science*. «Каждый из

этих методов сам по себе успешен, и они прекрасно дополняют друг друга, – говорит он. – Поэтому я не думаю, что методы машинного обучения просто вытеснят все остальные подходы». Квантовые компьютеры тоже найдут своё место, считает Мартин Реттелер, старший директор по квантовым решениям в компании IonQ, специализирующейся на разработке квантовых компьютеров на основе захваченных ионов. Хотя он соглашается, что классические подходы, вероятно, справятся с моделированием слабо коррелированных систем, он убеждён, что некоторые большие, сильно коррелированные системы останутся вне их досягаемости. «Экспоненциальный рост догонит вас, – предупреждает он. – Существуют случаи с сильно коррелированными системами, которые мы не сможем обрабатывать классически. Я абсолютно уверен в этом». По словам Реттелера, полноценный отказоустойчивый квантовый компьютер с гораздо большим числом кубитов, чем у существующих устройств, напротив, сможет моделировать такие системы. Это поможет открыть новые катализаторы или углубить наше понимание метаболических процессов в организме, что представляет большой интерес, например, для фармацевтической отрасли. Нейронные сети, вероятно, позволят расширить круг решаемых задач, полагает Джей Гамбетта, возглавляющий направление квантовых вычислений в IBM, но он сомневается, что они смогут справиться с самыми сложными задачами, важными для бизнеса. «Именно поэтому многие компании, связанные с химией, продолжают исследовать квантовые вычисления, ведь они точно знают, где методы аппроксимации дают сбой», – говорит он. Гамбетта также отвергает мысль о том, что эти технологии соперничают друг с другом. По его мнению, будущее вычислительной техники, скорее всего, будет основано на сочетании обоих подходов, где квантовые и классические программы будут работать сообща для решения задач. «Я не думаю, что они конкурируют. Скорее, они дополняют друг друга», – считает он. Однако Скотт Ааронсон, глава Центра квантовой информации в Техасском университете, утверждает, что методы машинного обучения непосредственно конкурируют с квантовыми компьютерами в таких областях, как квантовая химия

и физика конденсированных сред. Он прогнозирует, что сочетание машинного обучения и квантового моделирования во многих случаях превзойдёт чисто классические подходы, но это станет очевидно только после появления более крупных и надёжных квантовых компьютеров. «С самого начала я рассматриваю квантовые вычисления в первую очередь как научный поиск, а любые промышленные приложения – как приятный бонус, – говорит Ааронсон. – Поэтому, если квантовое моделирование окажется лучше классического машинного обучения лишь в редких случаях, я не буду так разочарован, как некоторые мои коллеги».

Одной из областей, где квантовые компьютеры, вероятно, обладают значительным преимуществом, является моделирование эволюции сложных квантовых систем во времени, отмечает Карлео из EPFL. Это может предоставить ценную информацию для учёных в таких областях, как статистическая механика и физика высоких энергий, но маловероятно, что найдёт практические применения в ближайшем будущем. «Это более специализированные приложения, которые, на мой взгляд, не оправдывают огромных вложений и всеобщего ажиотажа», – добавляет Карлео.

Тем не менее эксперты, с которыми беседовал MIT Technology Review, утверждают, что отсутствие коммерческих приложений не является поводом прекращать разработку квантовых вычислений, способных привести к фундаментальным научным прорывам в долгосрочной перспективе. «Наука подобна набору вложенных друг в друга матрёшек – решив одну задачу, вы сталкиваетесь с пятью новыми, – говорит Вичентини. – Сложность объектов нашего изучения со временем только возрастает, поэтому нам всегда будут нужны более мощные инструменты».

Заключение

Хотя квантовые компьютеры обещают революционные изменения в ряде отраслей, их реализация сталкивается с серьёзными техническими проблемами. В то же время успехи ИИ вызывают у части экспертов сомнения в необходимости таких инвестиций. Только будущее покажет, какая технология окажется более успешной в решении сложных научных задач.



Как фиктивные исследования подрывают науку, замедляя прогресс

В научном мире циркулируют сотни тысяч поддельных исследований. За последнее десятилетие тайные коммерческие организации по всему миру превратили производство, продажу и распространение фальшивых научных работ в индустрию. Эти «бумажные фабрики» зарабатывают деньги, подрывая доверие к научной литературе, на которую полагаются врачи, инженеры и исследователи при принятии решений, влияющих на человеческие жизни.

Масштабы проблемы

Точные масштабы проблемы оценить сложно. На сегодняшний день около 55 000 научных статей были отозваны по различным причинам, но эксперты считают, что количество поддельных работ может достигать нескольких сотен тысяч. Эти фальшивые исследования не только вводят в заблуждение, но и заставляют законных учёных тратить время и ресурсы на проверку сомнительных данных, уравнений, изображений и методологий, которые в итоге оказываются вымышленными.

Даже когда поддельные статьи обнаруживаются – часто благодаря усилиям энтузиастов, которые в свободное время проверяют публикации, – научные журналы не спешат их отзываться. Это позволяет фальшивым исследованиям оставаться в научной литературе, загрязняя глобальную базу знаний, которая должна служить источником достоверной информации для новых открытий и обсуждений.

Влияние на науку и медицину

Фальшивые исследования замедляют прогресс в критически важных областях, таких как разработка лекарств и методов лечения. Особенно сильно страдают сферы, связанные с онкологией и медициной, где поддельные данные могут вводить учёных в заблуждение и задерживать появление жизненно важных открытий. Например, исследования рака и COVID-19 оказались под угрозой из-за фальшивых статей, в то время как менее прикладные области, такие как философия и искусство, пострадали меньше.

Пример: история с молекулой SNHG1

Один из ярких примеров – случай с молекулой SNHG1, описанный в статье 2018 года в Американском журнале исследований рака. Онколог Фрэнк Чаковски из Университета Уэйна в Детройте заинтересовался этой молекулой, так как она, по утверждению авторов, могла взаимодействовать с химическими реакциями, которые он изучал в контексте рака простаты. Однако эксперименты Чаковски и его коллеги Стивена Зильске не подтвердили заявленных результатов.

Документы, опубликованные в 2022 году, вызвавшие тревогу Papermill Alarm

В 2022 году, когда Адам Дэй анализировал при помощи программного обеспечения Papermill Alarm своей компании публикации из базы данных OpenAlex, он обнаружил значительное количество потенциально фальшивых документов, особенно в области биологии, медицины, компьютерной науки, химии и материаловедения. Обнаруженные документы содержали текстовые сходства с известными подделками.

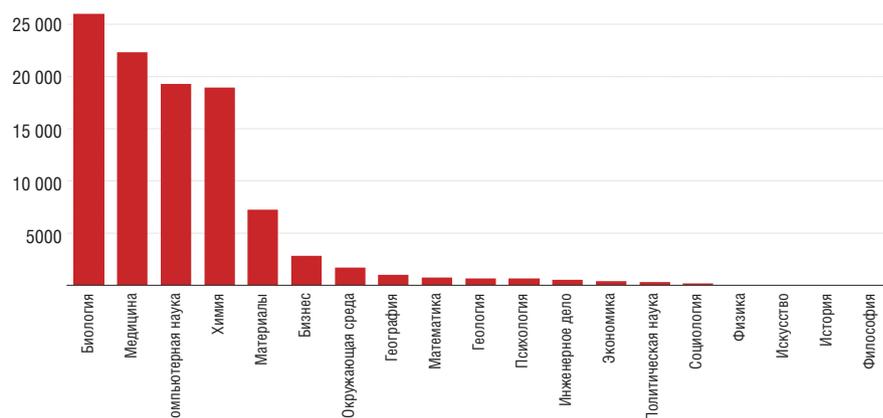


Chart: The Conversation, CC-BY-ND • Source: Clear Skies • Created with Datawrapper

Зильске заметил, что графики в статье содержали идентичные данные для разных ключевых линий, что практически невозможно в реальных экспериментах. После его обращения к редакции журнала статья была отозвана из-за «фальсифицированных материалов и/или данных». Чаковски отметил, что наука и так сложна, а фальшивые исследования только усложняют процесс поиска истины.

Проблемы системы рецензирования

Система рецензирования, призванная обеспечивать качество научных публикаций, далека от совершенства. Рецензенты, как правило, работают на добровольной основе и не всегда проверяют данные на достоверность, предполагая, что авторы действуют добросовестно. Кроме того, некоторые издатели могут выбирать рецензентов, которые с большей вероятностью одобряют статьи, чтобы избежать финансовых потерь, связанных с отклонением рукописей.

Ещё одна проблема – коррупция в системе рецензирования. Некоторые исследователи создают «круги взаимного цитирования», где они рецензируют работы друг друга. Бумажные фабрики могут создавать фальшивых рецензентов или даже подкупать редакторов журналов.

Масштабы проблемы бумажных фабрик

Точное время появления бумажных фабрик неизвестно, но первая статья, связанная с их деятельностью, была отозвана в 2004 году. С тех пор проблема только усугубилась. Анализ 53 000 статей, представленных шести издателям, показал, что от 2 до 46% заявок могут быть подозрительными. Например, издатель Wiley отозвал более 11 300 статей и закрыл 19 журналов, которые особенно пострадали от фальшивых публикаций.

По оценкам Адама Дэй из компании Clear Skies, около 2% всех научных статей, опубли-

кованных в 2022 году, могли быть сфабрикованы. В таких областях, как биология и медицина, этот показатель может достигать 3%, а в некоторых подразделах, например, в исследованиях рака, – ещё выше.

Возможные решения

Для борьбы с фальшивыми исследованиями предлагаются различные меры.

- 1. Улучшение системы рецензирования.** Рецензирование должно стать более прозрачным и строгим. Рецензенты должны получать вознаграждение за свою работу, а их отчёты – публиковаться, даже если статья отклонена.
- 2. Технологические инструменты.** Компании, такие как Clear Skies и Research Signals, разрабатывают инструменты для выявления поддельных статей. Например, инструмент Papermill Alarm помогает издателям обнаруживать работы, созданные «бумажными фабриками».
- 3. Международное сотрудничество.** Издатели и научные организации должны обмениваться данными и технологиями для борьбы с мошенничеством.
- 4. Изменение издательской модели.** Необходимо пересмотреть текущую модель, при которой издатели получают прибыль за счёт публикации статей. Вместо этого акцент должен быть сделан на обеспечение качества и прозрачности.

Заключение

Фальшивые исследования представляют серьёзную угрозу для науки, подрывая доверие к научной литературе и замедляя прогресс в критически важных областях. Борьба с этой проблемой требует совместных усилий учёных, издателей и технологических компаний. Только так можно сохранить целостность науки и обеспечить её дальнейшее развитие на благо человечества.