

学位論文内容の要旨

愛知学院大学

論文提出者	植松康明
論文題目	コサイン類似度プログラムによる歯科材料の 新規同定法

I. 緒言

口腔内に存在する修復物、補綴物の材料の同定は、法歯学的な探索、あるいはアレルギー疾患の原因の特定など、歯科領域において比較的頻繁に必要とされる技術である。分析には、誘導結合プラズマ分析法、蛍光 X 線分析法、エネルギー分散型 X 線分光法、波長分散型 X 線分光法などによる半定量的な方法が頻用されている。しかしながら、試料の状態、量は分析結果に大きな影響を及ぼし、アーティファクトの中にデータが埋もれてしまう場合も少なくない。このため、結果の判断には経験と分析機器の分析理論に熟知していることが測定者には求められ、原材料を決定する段階では、定量的な客観的数値として結果を表すことは成されてはいなかった。

一方、急速に進化しつつある人工知能の領域では、複雑なデータの集合から特徴量を抽出する手法が多数開発され、人工知能の訓練に用いられている。人工知能の入力データは通常多次元行列データとなり、その計算処理にはベクトルの内積が重要な位置を占めている。本研究では、自然言語処理におけるアテンションの中核部に使用されるコサイン類似度を用い、元素プロファイルの処理に応用することで、材料の種類識別を数値化する可能性を検討することとした。

II. 材料および方法

本研究では 3 種類の金属材料および 1 種類の硬組織材料を分析対象材料とした。金属材料は歯科鑄造用金銀パラジウム合金の金パラ Nice 12、歯科

鑄造用金合金の K. 18 M. C. ゴールドアロイ、および歯科鑄造用銀合金第 2 種
のミロブライトを選択した。硬組織材料には牛歯を選択した。さらに、比較
対照材料として金属焼付用陶材およびジルコニアを選択した。公示値には、
各製品の公式製品データによる元素組成、および牛歯の歯冠部エナメル質
の元素組成には無機成分の主成分であるハイドロキシアパタイト
($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$: 1,004.6 g/mol) から各元素の重量比を算出したものを
使用した。

試料合金 3 種の元素分析はインゴット状態で行った。インゴットは 100%
アルコール中で 20 分間超音波洗浄を行った後、アスピレーター中で 30 分
間乾燥させた。牛歯は分析機器の高真空維持のため 700°C で 1 時間加熱処理
し、完全に脱水した。各試料数は 10 とした。

試料合金は微量分析での検証を加えるため、3 種類の歯科用研削ポイン
ト (ホワイトポイント、茶色のシリコーンポイント、青色のシリコーンポイ
ント) を用いた。合金試料は 1 つにつき 1 つのポイントを用いて研削した。
研削はマイクロモーターを用い、40,000 rpm で、20 秒間手動で行った。

試料合金のインゴット、牛歯のエナメル質表面、試料合金を研削したポイ
ント表面の成分分析を、電界放出型電子線マイクロアナライザーを用いて
波長分散型 X 線分光法で行った。牛歯およびポイントは導電性付与のため、
カーボン蒸着を行った。分析条件は、電圧 20kV、プローブ径 1.0 μm とした。
得られた分析結果と公示値との類似度を、新規開発プログラムを用いて算

出した。すなわち、各元素の数値を多次元ベクトル (分析結果のベクトル \overrightarrow{OA} と公示値のベクトル \overrightarrow{OB}) として置き換え、その類似度をプログラムによって算出した。類似度の比較には、コサイン類似度計算を適用した。多次元空間における二つのベクトルの成す角度 θ を想定し、この角度が小さい場合に二つのベクトルの類似度は大きいと考える。 $\cos(\theta) = (A \cdot B) / (||A|| * ||B||)$ を用いて1つのスカラー値を得た。 $(A \cdot B)$ は二つのベクトルの内積を表し、 $||A|| * ||B||$ はベクトルのノルム積を表す。このプログラムを用いて、以下の組み合わせの類似度を算出した。

- (1) 試料合金インゴットの元素分析結果と原材料ならびに対照歯科材料の公示値との類似度
- (2) 牛歯の元素分析結果と原材料ならびに対照歯科材料の公示値との類似度
- (3) ポイント表面の試料研削粉の元素分析結果と研削された試料合金の公示値との類似度

さらに、ポイントの表面に付着した研削粉の形状を確認するため、ポイントの表面に付着した研削粉をカーボンテープに転写し、二次電子像を得た。

統計解析は、試料合金インゴットあるいは牛歯の分析結果と各公示値との類似度をダネットの検定を用いて統計的な差を検証した。また、ポイント間の統計的な差については、結果が正規分布とならなかったため、ノンパラメトリック検定の Steel-Dwass 検定を用いた。いずれも有意水準は 0.01 と

した。

Ⅲ. 結果

試料合金インゴットの波長分散型 X 線分光法の元素分析結果においては、合金の主たる構成元素が検出されたものの、いずれの元素もデータの変動が大きく、特に GN の Ag は最も標準偏差が大きい結果となった。牛歯の元素分析結果では、ハイドロキシアパタイトの構成成分である Ca、P、O の含有量が高く検出されたが、いずれも変動は大きく、微量ではあるものの Na、Mg、あるいは Cl が全ての分析で検出された。

試料合金を研削後のポイント表面の元素分析結果は、インゴットの分析結果で得られた元素数と比較して、著しく多くの他元素の検出が認められた。特にシリコーンポイントの分析結果は、検出元素数がホワイトポイントより多く、また Si に関してはデータの変動が最も大きかった。

上記の分析結果と、各原材料の公示値および他材料の公示値とのコサイン類似度を算出した。合金インゴットと原材料の公示値との類似度は、3 種類すべてにおいて 98% 以上の高い値を示した。また、他の公示値との比較では全ての組み合わせにおいて有意に低値を示し、他の合金との類似度も明確に低い値として示された。牛歯の元素分析結果と原材料の公示値（ハイドロキシアパタイトの標準値）との類似度は、93% 以上を示し、ハイドロキシアパタイト由来であるとの同定が可能であることが判明した。比較対照材料として用いたセラミックスとの一致度は明らかに低く算出され、金属の

公示値との一致は全くなかった。

ポイント表面の分析結果と原材料の公示値との類似度は、全て 80%以上を示し、特にホワイトポイントを使用した場合に有意に高い値を示した。ホワイトポイントを用いた平均値は 99.8%であった。

各ポイントで研削された研削粉の形状を二次電子像で確認した。ホワイトポイント上の研削粉は最も大きく、100~200 μm 程度の箔状を示した。一方、シリコンポイント上の研削粉は 1 μm 程度の粒状を示した。研削に用いた 3 種類の合金で研削粉の形状に違いは認めなかった。

IV. 考察

本研究により、材料の分析結果と種々の公示値の類似度を 1 つの数値で示すことが可能となり、その値から材料の特定を客観的に行う手法が確立された。また、複雑かつ夾雑なデータが混入する元素分析データからでも、コサイン類似度の算出により材料の特定に応用できる可能性が示唆された。

本研究で応用したコサイン類似度は、人工知能分野の自然言語処理における訓練で用いられるアテンションの中心核となる算出方法である。人工知能の学習段階において、妨げとなる夾雑データを排除し、認識すべき方向をベクトルの示す方向として捉え、その方向に学習を進める方法であり、この考え方を機器分析の評価に適用することを試みた、初めての研究である。

本研究で解析に用いた、波長分散型 X 線分光法は波長分解能が高いものの、特性 X 線を回折させて検出するため、試料の平行性が重要な因子とな

る。本研究で用いた試料はいずれも平行性を保たれた試料ではなく、特にポイント表面は曲面であることから、分析結果の偏り、ばらつき、精度の低下につながる事が予想される。しかしながら、使用した歯科用合金、牛歯、および微量研削粉からの同定において、原材料の公示値との類似度は高い一致度を示し、分析結果における変動の多いデータからでも、類似度は正確に計算された。

歯科用研削ポイントによる微量分析において、ホワイトポイントはシリコーンポイントと比較して有意に高い一致度を示した。分析範囲($\phi 1.0 \mu\text{m}$)を考慮すると、平滑面かつ研削直後の新鮮面による分析が可能となったため、分析精度の向上に寄与したものと考えられる。

本研究では類似度の算出方法にコサイン類似度を用い、有用性を確認したが、他の類似度計算の関数を用いることの有用性を検証した。候補として、サイン類似度計算を選択し、牛歯の分析結果と hidroksiapatit の一致度を計算した。結果、79.82(3.44)%となり、コサイン類似度よりも低値となった。

今後、類似度のアルゴリズムの検討あるいは人工知能そのものの導入により、さらに高度な分析手法が展開できるものと考えられる。