

令和 4 年 6 月 1 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2021

課題番号：19K10244

研究課題名（和文）AIを用いたCAD/CAMコンポジットレジン冠の長期耐久性向上の試み

研究課題名（英文）Development of AI model to explore optimum composition of CAD/CAM resin composites

研究代表者

山口 哲（Yamaguchi, Satoshi）

大阪大学・歯学研究科・准教授

研究者番号：30397773

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、国内で入手可能な全てのCAD/CAM冠用コンポジットレジンの組成と3点曲げ試験により得られるデータを用いて、現在臨床応用されている材料よりもはるかに高い長期耐久性を達成できる理想的な組成を人工知能により明らかにした。本研究によって得られた成果は、既存のCAD/CAM冠の弱点を明確にし、新規材料を開発するための具体的な設計指針となるものと考えられる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、大臼歯への適用に求められる物理的・化学的特性の要件を満たしたうえで、従来品と比べてさらに高い長期耐久性を達成できるCAD/CAM冠用コンポジットレジンの組成をAIにより構築した学習モデルを用いて明らかにした。本研究によって得られた成果は、既存のCAD/CAM冠の弱点を明確にし、新規材料を開発するための具体的な設計指針となることが期待できる。

研究成果の概要（英文）：The artificial intelligence (AI) models established in this study successfully predicted the flexural strength of CAD/CAM RCBS and identified the effective components that affected flexural strength based on the available dataset.

研究分野：歯科材料学

キーワード：人工知能 機械学習 CAD/CAMコンポジットレジン冠 修復材料 長期耐久性

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

市販の CAD/CAM 冠用コンポジットレジンには、シリカフィラーとマトリックスレジンで構成されており、これらがシランカップリング処理により結合することで、コンポジットレジン全体の強度を高めている。研究代表者は、ミクロ/マクロ構造の連携解析を可能とする *in silico* マルチスケール解析により、フィラーの粒径が小さいほどコンポジットレジン全体の強度が向上し、最大主ひずみを基準にミクロ構造から破壊が生じていることを突き止めた。そして、*in vitro* での加速疲労試験により、ナノフィラーをマトリックスレジンにバランス良く充填した CAD/CAM 冠においては、長期耐久性が高くなることを明らかにした。しかし、なぜ長期耐久性が高くなったのかについての厳密なメカニズムは特定できておらず、それを明らかにするためには、CAD/CAM 冠用コンポジットレジンのミクロ構造内で起こっている現象をさらに詳細に理解する必要がある。さらに、実際の臨床使用条件下での耐久性向上のためには、曲げ強さなどの物理的特性だけでなく、口腔内での使用を想定した吸水によるフィラーとマトリックスレジンとを結合するシランカップリング剤あるいはマトリックスレジンの加水分解など、化学的特性の変化も考慮に入れた材料設計が求められる。

### 2. 研究の目的

本研究では、国内で入手可能な全ての CAD/CAM 冠用コンポジットレジンの組成と 3 点曲げ試験により得られるデータを用いて、現在臨床応用されている材料よりもはるかに高い強度を達成できる理想的な組成を人工知能 (Artificial Intelligence: AI) により明らかにすることを目的とした。本研究によって得られた成果は、既存の CAD/CAM 冠の弱点を明確にし、新規材料を開発するための具体的な設計指針となることが期待できる。

### 3. 研究の方法

本研究では、従来品と比べて高い曲げ強度を有するコンポジットレジンを作成するために必要な組成を明らかにする。そのために、以下の項目にしたがって段階的に実験を遂行した。

#### (1) 学習に使用する入出力データの準備

##### 【*in vitro* 試験】

市販されている 12 種の CAD/CAM 冠用コンポジットレジンを用いて 3 点曲げ試験を実施し、各種材料の曲げ強さを記録した。試料数は各種 10 個とした。

##### 【*in silico* 解析】

12 種の CAD/CAM 冠用コンポジットレジンの組成 (フィラーの種類、含有率とモノマーの種類) を用いて AI の学習に使用する入力データを作成した。

#### (2) 学習モデルの生成と検証

##### 【*in vitro* 試験】

CAD/CAM 冠は、平成 26 年 4 月に保険適用になったばかりの新規材料であるため、本申請後に新製品が発売される可能性が高い。その場合、上記と同様に 3 点曲げ試験を行い、入出力データの個数 (AI の学習に使用するデータの個数) を増やすこととした。

##### 【*in silico* 解析】

作成した入出力データを用いて学習モデルを生成した。学習モデルの生成には、Random forest (RF)、Extra trees (ET)、Gradient boosting decision tree (GBDT)、Light gradient boosting machine (LightGBM) と eXtreme Gradient boosting (XGBoost) の 5 種を用いた。

#### (3) 理想的な組成の探索

破壊にいたるまでに負荷した荷重から得られた曲げ強さが最大になる組成の組み合わせを全探索 ( $2^{14} \times 24$  (393,216 通り)) した。あわせて特徴量重要度解析により、曲げ強さに影響を及ぼす因子を特定した。

### 4. 研究成果

#### (1) 学習に使用する入出力データ

フィラーの種類の場合、 $\text{SiO}_2$ 、 $\text{ZrO}_2$ 、 $\text{AlO}_3$  などが含まれていれば「1」、含まれていなければ「0」として数値へ変換し、学習のときにベクトルとして数学的に取り扱えるようにした。さらに「1」を 0.95~1.01、「0」を 0~0.1 の範囲で 0.01 刻みに増加することで、入力データを合計で 120 個とした。

#### (2) 学習モデルの生成と検証

RF, ET, GBDT, LightGBM, XGBoost を用いて、作成した入力データをもとに、Python を用いて学習モデルを生成することに成功した。5 種のモデルのうち、GBDT モデルが最も高い性能を示した。

(3) 理想的な組成の探索

曲げ強さを出力とする学習モデルを構築し、16 種の特徴量（フィラーの種類、モノマーの種類、フィラーの含有率）を対象に 393,216 通りの全ての組み合わせを用いて曲げ強さを網羅的に予測することに成功した（図 1）。さらに、特徴量重要度解析を実施することで、曲げ強さの向上あるいは低下に寄与している主な要因がフィラー含有率と TEGDMA であることを突き止め（図 2）、これまでに報告されている傾向と合致していることを確認するとともに構築した学習モデルの有用性が高いことを実証した。

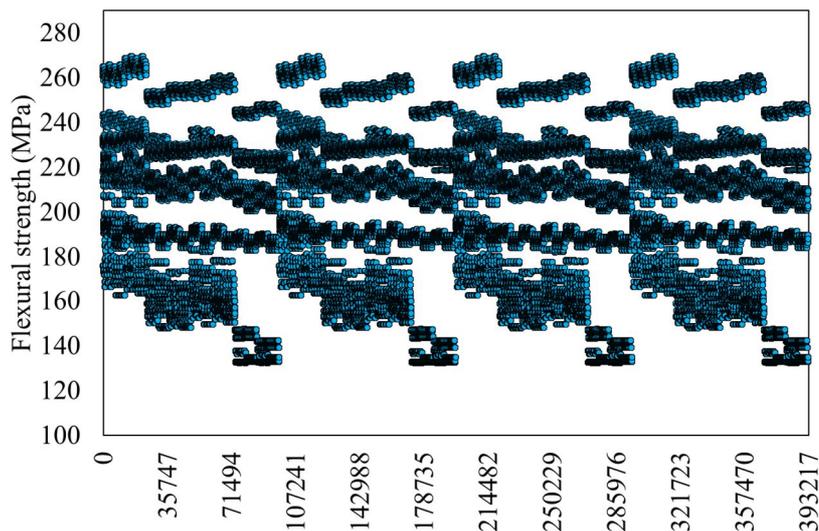


図 1. 393,216 通りの組み合わせを用いて予測した曲げ強さ（GBDT モデルの場合）

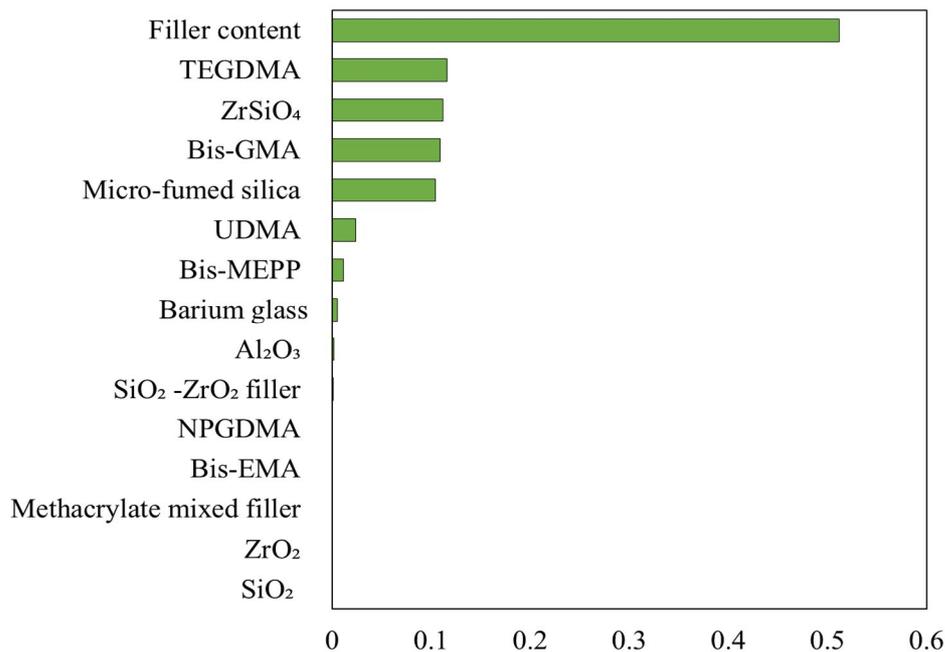


図 2. 特徴量重要度解析の結果（GBDT モデルの場合）

新規の材料開発にはその組成の組み合わせの多さがゆえに、膨大な時間とコストがかかることから、本研究で構築した AI モデルを活用して効率的に組成の組み合わせを探索することができれば、CAD/CAM 冠用コンポジットレジンの開発のみならず、歯科用セラミックスや金属などの他の歯科材料の開発にも役立つものと期待できる。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 8件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Karaer O, Yamaguchi S, Nakase Y, Lee C, Imazato S	4. 巻 104
2. 論文標題 In silico non-linear dynamic analysis reflecting in vitro physical properties of CAD/CAM resin composite blocks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials	6. 最初と最後の頁 103697 ~ 103697
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmbbm.2020.103697	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Yamaguchi S, Lee C, Karaer O, Ban S, Mine A, Imazato S	4. 巻 98
2. 論文標題 Predicting the Debonding of CAD/CAM Composite Resin Crowns with AI	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Dental Research	6. 最初と最後の頁 1234 ~ 1238
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1177/0022034519867641	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Lee C, Kashima K, Ichikawa A, Yamaguchi S, Imazato S	4. 巻 39
2. 論文標題 Influence of hydrolysis degradation of silane coupling agents on mechanical performance of CAD/CAM resin composites: &lt;i>In silico&/i> multi-scale analysis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Dental Materials Journal	6. 最初と最後の頁 803 ~ 807
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4012/dmj.2019-223	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する
1. 著者名 Yamaguchi S, Katsumoto Y, Hayashi K, Aoki M, Kunikata M, Nakase Y, Lee C, Imazato S	4. 巻 112
2. 論文標題 Fracture origin and crack propagation of CAD/CAM composite crowns by combining of in vitro and in silico approaches	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials	6. 最初と最後の頁 104083 ~ 104083
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmbbm.2020.104083	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Sakai T, Li H, Abe T, Yamaguchi S, Imazato S	4. 巻 37
2. 論文標題 Multi-scale analysis of the influence of filler shapes on the mechanical performance of resin composites using high resolution nano-CT images	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Dental Materials	6. 最初と最後の頁 168 ~ 174
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dental.2020.10.030	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Li H, Sakai T, Tanaka A, Ogura M, Lee C, Yamaguchi S, Imazato S	4. 巻 -
2. 論文標題 Interpretable AI Explores Effective Components of CAD/CAM Resin Composites	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Dental Research	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1177/00220345221089251	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakase Y, Yamaguchi S, Okawa R, Nakano K, Kitagawa H, Imazato S	4. 巻 38
2. 論文標題 Physical properties and wear behavior of CAD/CAM resin composite blocks containing S-PRG filler for restoring primary molar teeth	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Dental Materials	6. 最初と最後の頁 158 ~ 168
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.dental.2021.11.001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hoshino IAE, Dos Santos PH, Briso ALF, Sundfeldt RH, Yamaguchi S, Rocha EP, Anchieta RB	4. 巻 -
2. 論文標題 Biomechanical performance of three fiberglass post cementation techniques: Imaging, in vitro, and in silico analysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Prosthodontic Research	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2186/jpr.JPR_D_21_00253	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Lee C, Yamaguchi S, Imazato S	4. 巻 -
2. 論文標題 Quantitative evaluation of the degradation amount of the silane coupling layer of computer-aided design/computer-aided manufacturing resin composites by water absorption	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Prosthodontic Research	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2186/jpr.JPR_D_21_00236	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計8件(うち招待講演 7件/うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Yamaguchi S
2. 発表標題 Potential of artificial intelligence technology to assist future restorative dentistry
3. 学会等名 The 3rd SNUSD International Conference for Future Dentistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yamaguchi S
2. 発表標題 Challenge for reinforcement of resin composites by fusion of in vitro and in silico approach
3. 学会等名 The 4th Meeting of the IADR-APR (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yamaguchi S
2. 発表標題 AI-based prediction of failure in CAD/CAM resin composites
3. 学会等名 2020 Pusan National University School of Dentistry, Research Fair (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yamaguchi S
2. 発表標題 Artificial intelligence for failure prediction of CAD/CAM composite crowns
3. 学会等名 Joint Research Symposium of Osaka University and Newcastle University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Lee C, Yamaguchi S, Imazato S
2. 発表標題 Prediction of hydrolysis amount of silane coupling layer in CAD/CAM resin composite blocks
3. 学会等名 第75回日本歯科理工学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yamaguchi S
2. 発表標題 Challenges for analyzing fracture behavior in dentistry
3. 学会等名 Minnesota Dental Research Center for Biomaterials and Biomechanics Seminar (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yamaguchi S
2. 発表標題 Innovative applications of AI for future dentistry
3. 学会等名 2022 AADOCR/CADR Annual Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口 哲
2. 発表標題 補綴・インプラント治療の支援を目指した人工知能の応用
3. 学会等名 日本歯科理工学会近畿・中四国地方会冬期セミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 機械学習モデルを作成するシステム、方法、およびプログラム	発明者 山口 哲、今里 聡	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、J12100T149	出願年 2021年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

<p>大阪大学大学院歯学研究科顎口腔機能再建学講座（歯科理工学教室）  <a href="https://web.dent.osaka-u.ac.jp/techno/Researchmap">https://web.dent.osaka-u.ac.jp/techno/Researchmap</a>  <a href="https://researchmap.jp/YamaguchiS_30397773">https://researchmap.jp/YamaguchiS_30397773</a>          大阪大学研究者総覧  <a href="https://rd.iai.osaka-u.ac.jp/ja/9db559375ecbda5c.html?k=%E5%B1%B1%E5%8F%A3%E5%93%B2">https://rd.iai.osaka-u.ac.jp/ja/9db559375ecbda5c.html?k=%E5%B1%B1%E5%8F%A3%E5%93%B2</a>          歯科理工学教室（Publications）  <a href="https://web.dent.osaka-u.ac.jp/techno/publications.html">https://web.dent.osaka-u.ac.jp/techno/publications.html</a></p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	今里 聡  (Imazato Satoshi)  (80243244)	大阪大学・歯学研究科・教授    (14401)	

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	李 春雨  (Lee Chunwoo)  (90910224)	大阪大学・歯学研究科・招へい教員    (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
トルコ	アンカラ大学歯学部			