非線形最適化アルゴリズムによる 全運動軸の自動探索法について

On a method of searching the kinematic axis point using non-linear optimization algorithms.

林 豊彦, 加藤一誠, 石岡 靖

Toyohiko Hayashi, Kazumasa Kato, Kiyoshi Ishioka

新潟大学歯学部歯科補綴学第1教室

First Department of Prosthetic Dentistry, School of Dentistry,
Niigata University

1. はじめに

顎関節における顎頭の位置およびその運動路は、咬合の再構築、顎口腔系機能異常の診断、矯正治療など、歯科臨床の多くの分野において重要な意味を持っており、顎口腔系機能と調和した顎頭位、顎頭運動とは何かという問題に対して様々な側面から研究が進められてきた¹⁾。

その中で顎頭の動態に関する重要な成果として、MuCollumによるHinge axisの発見(1939)と河野による全運動軸(Kinematic axis)の発見(1968)^{2),3)}が挙げられる。両者の重要性は、ある顎頭運動に対する実用的なモデルを確立したこととあり、前者は、Hinge movementにおいて蝶番軸(Hinge axis)が顎頭内に存在することを示し、後者は、より広い矢状面内運動において運動路の矢状面投影が1本の曲線に近い点が顎頭内にあることを示した。

全運動軸の持つ顎路が矢状面運動における下顎位によらず顎路が一定であるという性質は、咬合器にトランスファーされる後方基準点として適しており⁵⁾、また、回転移動と前後的なシフトとに顎頭運動を分解できる点であることから、顎頭運動を分析する際の基準点としても適している。

著者らは、近赤外線発光ダイオードと半導体位置センサを用いた、非接触型3次元下顎運動測定システムを開発し、臨床応用を行ってきた^{6),7)}。計測した下顎の3次元運動から全運動軸を求める場合、従来は、ディスプレイに顎頭

点の運動路を表示し、河野による試行錯誤法⁴⁾を用いて探索的に運動路の上下幅が最小となる点を決定していた。

ところが実際に探索を行ってみると、ある方向に対しては上下幅の変化が少ないため、必ずしも探索は容易ではなく、その再現性にも乏しいように思われた。また、上下幅として何をとるかによっても最適点は変化してしまう可能性があった。これらの実際上の問題を解決するためには、第1に全運動軸を定量的に定義し、第2にそれを満たす点、即ち全運動軸をコンピュータによって自動的に決定する方法を開発する必要があるように思われた。

本論文では、応用に応じて比較的柔軟に変形できる運動路の上下幅の定量化方法について提案し、さらにこの評価基準にもとづいて逐次近似的に全運動軸を探索する方法について検討した結果、安定に求めることのできるアルゴリズムを得ることができたので報告したい。

2. 問題の定式化

1 矢状面内での全運動軸上の点は、河野による最初の論文³⁾によれば、「矢状面運動において運動路の矢状面投影図での上下幅が最小となる下顎上の点」と定義されている。しかし、全運動軸軸といえども、その運動路が完全な1本の曲線となるわけではなく、上下的な厚みを持つことから、上下幅として何をとるかによって全運動軸軸の位置は変化することになる。

咬合器への応用を考えた場合は、咬頭嵌合位付近の滑走運動付近での厚みが最小となること好ましいし、限界運動路の診断などでは運動路全体の上下幅が最小となる方が使いやすいように思われる。このように全運動軸の定義は、その臨床応用によって最適な定義方法を用いればよく、必ずしも特定の1つに限定する必要はないように思われた。

著者らは、下顎上のある点についての運動路の上下幅として次のような量を定義し、それを全運動軸決定のための評価関数とした。

下顎と上顎に、それぞれ直行座標系 $0_i - \eta_i$ 、 $0 - XY$ を設定する(図1)。座標系が2次元なのは、矢状面内運動を2次元剛体運動とみなしているためである。以後、 $0_i - \eta_i$ を下顎座標系、 $0 - XZ$ を上顎座標系と呼ぶことにする。下顎座標系での座標が $c_i^T = (x_i, z_i)$ の点Cの矢状面内運動での離散的な運動路データを $\{c_{ui}^T = (x_i, z_i)\}_{i=1}^n$ とする。ここで n はデータ数である。この点列 $\{(x_i, z_i)^T\}$ に曲線 $z = F(x)$ を当てはめる。本プログラムでは曲線の当てはめに選点直交多項式を用いた⁹⁾。

図1 矢状運動路データへの曲線の当てはめによる上下幅の定量化。

全運動軸点は最も1本の曲線に近い点だから、データ点列と当てはめた曲線とのZ方向(上下方向)の誤差 $e_i = z_i - F(x_i)$ をとり、その2乗和、

$$S(c) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (z_i - F(x_i))^2 \quad (1)$$

を点Cの運動路の1本の曲線からのずれを表す評価関数とした。すると全運動軸決定の問題は、「 $S(c)$ を最小化する下顎上の点Cをもとめよ」という問題に定式化される。

矢状面投影でみた顎頭運動路データのサンプルは、等時間間隔サンプリングされたものであるため、等移動距離とはならない。したがって、(1)式で1本の曲線からのずれを表した場合、サンプルの多い下顎位が重視されることになる。そこで本プログラムでは、重みをできるだけ一定にするために、平均的顎頭点で等移動距離サンプルとなるように測定データより再サンプリングする方法をとった(図1)。

前述のように運動路の特定な部分(例えば咬頭嵌合位付近)をより重視したい場合には e_i のかわりに重み w_i をつけた $w_i e_i$ を用いればよい。

3. 問題の解法

3. 1 最適化アルゴリズムについて

本節では、非線形最適化アルゴリズム^{9), 10)}のなかで最も典型的な勾配法(gradient method)について説明する。

問題を「最小化 $S(c)$, $c \in R^n$ 」とすれば、勾配法は、

$$S(c_{n+1}) < S(c_n),$$

となる点列 $\{c_n\}$ を逐次近似式、

$$c_n = c_{n-1} - R_n \nabla S(c_{n-1}), \quad (2)$$

により生成する方法をいう。

問題の解集合を $\Omega = \{c; \nabla S(c) = 0\}$ とすれば、式(2)は $c \in \Omega$ のとき $\nabla S(c) = 0$ であるから、ある条件のもとで収束する。

図2は $0_i - \eta_i$ 系での座標 c に対する評価関数 $S(c)^{1/2}$ の値を3次元表示したものであり、勾配法による探索手順の概念を図示したものである。

図2 勾配法による最適点の探索法.

勾配法には行列 R_n をいかにとるかによって様々なアルゴリズムが存在する。本論文では、その中でも特に代表的な最急降下法 (steepest descent method) とNewton法 (Newton's method) を用い、全運動軸の探索における両者の性能に違いについて比較を行った。さらに両者を組み合わせたHybrid法について調べたところ、良好な結果が得られたので報告したい。

3. 2 Newton法

Newton法は行列 R_n としてヘッセ行列,

$$R_n = \begin{bmatrix} S_{\eta\eta} & S_{\eta\xi} \\ S_{\xi\eta} & S_{\xi\xi} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$S_{\alpha\beta} = (\partial^2 / \partial \alpha \partial \beta) S(c_{n-1}),$$

を用いる方法である。

Newton法は、解のごく近傍では2次収束し、収束が速いことが知られている。しかし、一般の条件下では大局的収束性(global convergence property)が保証されておらず、収束しうる出発点の領域が限られるという欠点がある。

図3に平均的顆頭点周辺における評価関数 $S(c)^{1/2}$ の等高線およびNewton法で収束しうる領域を示した。データとしては図1のデータを用いている。また○は逐次近似のステップを示したもので、この場合、出発点1から4回目で収束している。

図3 評価関数 S の等高線とNewton法による探索手順.

図4は求まった全運動軸点とその周辺の点における運動路を表示したものである。×印で示した全運動軸点の運動軌跡は、目視的に判断しても全運動軸点として適しており、(1)式による評価関数の定義が実際に有効であることが分かる。

一般に探索の出発点を平均的顆頭点とするため、全運動軸が平均的顆頭点に近い場合は、この方法でも問題はないが、図3から分かるように収束しうる範囲が狭いため(特に上方向)、比較的両者が離れている場合は発散してしまう恐れがある。

(3)式は微分を含むが、(1)式による関数 S の定義から分かるように直接 S を微分できないため、差分で近似しなければならない。その詳細については4.1で述べることにする。

図4 全運動軸点とその周囲の点における矢状顆路.

3. 3 最急降下法

最急降下法は、 r_n をスカラー、 I を恒等変換とすれば、行列 R_n として、

$$R_n = r_n I, \quad (4)$$

を用いる方法である。ここでスカラー r_n は各ステップで、関数

$$\Psi(r_n) = S(c_{n-1}) + r_n \nabla S(c_{n-1}) \quad (5)$$

を最小化する条件から決定される。

(5) 式より、 $\nabla S(c_{n-1})$ 方向に対して評価関数 S が最小となる r_n を求めればよいが、必要条件である方程式 $\partial \Psi / \partial r_n = 0$ を直接解くことができないため、 c_{n-1} の周りで線形近似し、近似解

$$r_n = - \frac{S_{\eta\eta}^2 + S_{\xi\xi}^2}{S_{\eta\eta}^2 S_{\eta\eta} + 2 S_{\eta\xi} S_{\xi\eta} + S_{\xi\xi}^2} \quad (6)$$

を求めた。この方法は関数 S を r_n の関数とみなし、 $\nabla S(c_{n-1})$ 方向に対してNewton法を適用したものといえる。

図5に、図3と同じデータにおける最急降下法の収束状態を示した。

図5 最急降下法による探索手順 ; データは図3と同じ。

この方法の特徴は、収束域が広いという利点があるものの(図5では図の全領域)、図5からも分かるように収束が遅いという欠点があり、特に解の近傍ではそれが著しいことが分かる。したがって、アルゴリズムの停止基準を比較的ゆるくしない限りアルゴリズムが停止せず、この方法のみでは実用的ではなかった。

3. 4 Hybrid法

Newton法を用い、9顆頭について実際に探索を行った結果、平均的顆頭点を出発点とした場合、9顆頭中7顆頭で収束したが、2.2で示したように収束域が狭いため、出発点が全運動軸点より離れていた2顆頭では収束しなかった。このような場合、勾配法では、始め収束速度は遅いが収束が確実な最急降下法を用いて近似解を解の近傍まで近づけ、その後、収束速度の速いNewton法を用いて収束を速める方法がよくとられる。そこで本プログラムでも最急降下法とNewton法を組み合わせ、確実に収束するHybridアルゴリズムを開発した。

Hybrid法では、最急降下法からNewton法へ移行する際に、Newton法が十分収束できる程度に逐次近似解が解に近づくかどうかを判断しなければならない。図3から分かるように、最急降下法で近似解が解に近づくとき修正経路が振動し始め座標の修正成分のノルムが小さくなることから、アルゴリズムを変更する際の判断基準を $\| R_n \nabla S(c_{n-1}) \|^2$ の大きさとした。その域値は、9顆頭のデータを用い試行錯誤的に決定し、0.3とした。図6にHybrid法のフローチャートを示す。

最適点では、 $\nabla S = 0$ となることから $|\partial S / \partial \eta|$ と $|\partial S / \partial \xi|$ を収束の判断基準とし、両者がともにある域値 ε 以下となったときに収束したとみなした。異なった出発点からアルゴリズムを開始しても収束点の座標が 0.001 mm 以上変化しないことを条件とし、 ε を試行錯誤的に $\varepsilon = 10^{-6}$ に決定した。

図3、図5と同じデータに対して、出発点を図5と同じとしてHybrid法を適用した結果を図7に示した。反復が $n=6$ でNewton法に移行し、 $n=9$ で収束しており、収束可能域もNewton法と比較して実用的にはほぼ問題ない程度に拡大することができた。しかし部分的に収束不能域がみられるが、これはNewton法に移行した際まだ十分に解に近ずいていなかったためであり、アルゴリズムの移行条件については再考の余地があるように思われた。

図6 Hybrid法のフローチャート。

図7 Hybrid法による探索手順；データは図3と同じ。

4. 各種パラメータの決定

4. 1 数値微分について

評価関数 S は点 C の座標 c で直接に微分できないため、 ∇S の値は差分をもちいて近似しなければならない。この数値微分については様々な方法があるが、ここでは以下の公式

$$\partial S / \partial \eta = (S_{-2,0} - 8S_{-1,0} + 8S_{1,0} - S_{2,0}) / (12h),$$

$$\partial^2 S / \partial \eta^2 = (-S_{-2,0} + 16S_{-1,0} - 30S_{0,0} + 16S_{1,0} - S_{2,0}) / (12h^2),$$

$$\partial^2 S / \partial \xi \partial \eta = (S_{1,1} - S_{-1,0} - S_{1,-1} + S_{-1,-1}) / (4h^2),$$

$$S_{i,j} = S((\eta + ih, \xi + ih)^T),$$

(7)

を用いた。ここで h は分点間隔 (grid size) であり、シミュレーションによる実験結果より h が $0.2 \sim 2.0$ mm であれば収束値が真の最適値よりも 0.1 mm 以上誤差を持つことはなかったため、 $h = 1.0$ mm に決定した。

4. 2 選点直交多項式の次数

データ点列 $\{(x_i, z_i)^T\}$ に曲線を当てはめる場合、多項式の次数 (Polynomial order) m が低すぎると曲線が矢状顎路曲線に追従できなくなり、逆に高すぎると計算時間がかかり、著しく高い場合は不要な振動が生じる。最適次数 m の決定には、赤池の情報基準量 AIC を応用する方法が提案されているが⁸⁾、顎路への当てはめにこれを応用してみたところ、 m が 2 か 3 次で AIC は最小値をとり、それ以上では不規則な増減を繰り返し、意味ある最適値を求めることはできなかった。そこで次数 m を変化したときの収束点座標の変化を調べ、収束点座標が大きく変化しない最低の次数を求めた。

図8に、次数15のときの収束点を基準としたときの各次数での収束点の座標の偏位 (直線距離) を、5顆頭の運動データについて示した。

図8より次数が5次以上では収束点の偏位は0.1 mm 以下であることが分かる。したがってプログラムでは次数の既定値を5次とし、さらにマニュアルでも設定できるようにした。

図8 直交多項式の次数と収束点の偏位 ; 基準点, 次数15のときの収束点; データ点数, 100.

図9 データ点数と収束時間との関係 ; 直交多項式の次数, 5.

4. 3 データ点数

2章では, 各下顎位での重みを一定にするために測定データより再サンプルする方法について示したが, サンプルの粗さは明らかに評価関数Sの分布に影響を与え, 結果として収束点座標を変化させる。また図9に示したようにデータ点数(sample size)は少ないほど計算時間が短く有利であることから, どの程度のデータ点数があれば収束点座標が変化せず安定に求まるかについて調べた。

図10に, データ点数100のときの収束点座標を基準としたときの20, 40, 60, 80の各点数での収束点座標の偏位(図8と同じく直線距離)を示した。図10よりデータ点数による収束点座標の変化は意外と少なく, 40点以上あれば偏位は0.2 mm 以下であることが分かる。ただしここで用いた下顎運動データは正常有歯顎者のものであり, 異常者や多数歯欠損者ので同じ結果が得られるという保証はなく, 今後さらに検討が必要と思われた。

図10 データ点数による収束点の偏位 ; 基準点, データ点数 100のときの収束点; 直交多項式の次数, 5.

5. まとめ

- 1) 3点3次元法にもとずいて計測された下顎の3次元運動データより、全運動軸点を自動的に探索するプログラムを開発した。
- 2) 任意の顎頭点に対してその矢状面運動路の上下幅を表す関数を、矢状顎路に当てはめた多項式曲線とデータとの上下的な偏差の2乗和により定義した。
- 3) 2)で定義した評価関数を最小化する点(全運動軸点)を求めるために、非線形最適化アルゴリズムのなかの勾配法を応用し、そのなかでNewton法と、Newton法と最急降下法を組み合わせたHybrid法が実用的であることが分かった。
- 4) 実際に計算を行うために必要な数値微分の方法および分点間隔、曲線の多項式の次数について、実験的に最適な方法および最適値を決定した。また、安定した最適点を得るために必要な必要最低限のデータ点数について調べた。
- 7) 林 豊彦, 塩沢恭郎, 他: 下顎運動の3次元測定解析システムの開発, 信学技報, MBE 82-32, 55/62, 1982.
- 8) 森 正武: 曲線と曲面, 教育出版社, 1974.
- 9) ヤ・ゼ・チブキン: 制御系における適応と学習, 共立出版社, 1979.
- 10) 今野 浩, 山下 浩: 非線形計画法, 日科技連出版社, 1978.

文献

- 1) 石原寿郎, 長谷川成男, 藍 稔: 下顎運動と咬合器, 日本歯科評論, 1975.
- 2) 河野正司: 下顎の矢状面内運動に対応する顎頭運動に関する研究 第1報 断層X線写真による観察, 補綴誌, 12, 337/349, 1968.
- 3) 河野正司: 下顎の矢状面内運動に対応する顎頭運動に関する研究 第2報 マルチフラッシュ装置による矢状面運動軸の解析, 補綴誌, 12, 350/380, 1968.
- 4) 河野正司, 福島俊士: 全運動軸の描記法による求め方, 補綴誌, 17, 121/125, 1973.
- 5) 河野正司, 藍 稔: 全運動軸とその意義について, 歯界展望, 41-4, 593/600, 1973.
- 6) 塩沢恭郎, 林 豊彦, 他: 下顎任意点の運動解析 第1報 測定システム, 補綴誌, 25-3, 499/507, 1981.