

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

UNIVERSITÉ BADJI MOKHTAR - ANNABA  
BADJI MOKHTAR – ANNABA UNIVERSITY



جامعة باجي مختار – عنابة

Faculté : Technologie

Département : Génie mécanique

Domaine : science et technologie

Filière : Génie mécanique

Spécialité : Génie des matériaux

Mémoire

Présenté en vue de l'obtention du Diplôme de Master

Thème:

**Optimisation des performances des implants de hanche et dentaires par intégration de la simulation en dynamique moléculaire et de l'analyse par éléments finis**

Présenté par : *BENHADID Habib Errahmène*

Encadrant : *Bougoffa Med Seyf Eddine*

Grade : MCB

Université : UBMA

**Jury de de soutenance :**

BOURENANE Rabah	Pr	UBMA	Président
GHELLOUDJ Oualid	MCA	UBMA	Examineur
BOUGOFFA Med Seyf Eddine	MCB	UBMA	Encadrant

Année Universitaire : 2024/2025

## Table des matières

Dédicaces .....	4
<b>Remerciements .....</b>	<b>5</b>
Résumé .....	6
Introduction générale.....	9
Chapitre 1 : Les implants biomédicaux – État de l’Art .....	11
<b>I. Introduction.....</b>	<b>12</b>
<b>I.1. Implants de hanche.....</b>	<b>12</b>
<b>I.1.1. Matériaux des implants de hanche.....</b>	<b>13</b>
I.1.1.1. Les alliages.....	15
I.1.1.2. Céramiques.....	17
I.1.1.3. Polymères.....	17
I.1.1.4. Composites.....	17
I.1.2. Défis liés à la fatigue et aux charges axiales.....	18
<b>I.2. Implants dentaires .....</b>	<b>19</b>
I.2.1. Avantages et risques des implants dentaires .....	20
I.2.2. Matériaux typiques des implants dentaires .....	21
I.2.3. Les types d’implant dentaires .....	21
I.2.4. Contraintes spécifiques liées à la mastication.....	23
<b>I.3. Simulations numériques .....</b>	<b>23</b>
<b>I.3.1 Dynamique moléculaire (MD) avec LAMMPS .....</b>	<b>24</b>
I.3.1.1. Principes .....	24
I.3.1.2. Avantages de LAMMPS pour l’échelle atomique.....	27
<b>I.3.2. Analyse par éléments finis (FEA) avec ANSYS.....</b>	<b>28</b>
I.3.2.1. Concepts de base .....	29
I.3.2.2. Utilisation en ingénierie biomécanique .....	30
I.3.2.3. Modélisation mécanique, maillage, et conditions aux limites .....	31
I.3.2.4. Avantages d’ANSYS pour l’échelle macroscopique.....	33
Chapitre 2 : Analyse multi-échelle par simulation de dynamique moléculaire et éléments finis.....	34
<b>II.1. Introduction .....</b>	<b>35</b>
<b>II.2. Simulations avec ANSYS (l’analyse par éléments finis) .....</b>	<b>35</b>
<b>II.2.1. Les implants de hanche.....</b>	<b>35</b>
II.2.1.1. Analyse des contraintes et des déformations (Stress and Strain Analysis) .....	35
II.2.1.2. Analyse de fatigue.....	37
<b>II.3. Simulations avec LAMMPS (la dynamique moléculaire).....</b>	<b>38</b>
<b>II.3.1. Les implants de hanche.....</b>	<b>38</b>
II.3.1.1 Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS .....	38

<b>II.4. Simulations avec ANSYS (l'analyse par éléments finis)</b>	<b>40</b>
<b>II.4.1. Les implants dentaires</b>	<b>40</b>
1. Analyse des contraintes et des déformations	40
2. Analyse de fatigue	41
<b>II.5. Simulations avec LAMMPS (la dynamique moléculaire)</b>	<b>42</b>
<b>II.5.1. Les implants dentaires</b>	<b>42</b>
II.5.1.1. Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS	42
<b>Conclusion</b>	<b>43</b>
<b>Chapitre 3 : Résultats et discussion</b>	<b>44</b>
<b>III.1. Simulation par ANSYS de l'implant de hanche à l'échelle macroscopique</b>	<b>45</b>
<b>III.1.1. Analyse des contraintes et des déformations</b>	<b>45</b>
III.1.1.1. Carte de contraintes de von Mises et Déplacement total	45
III.1.1.2. Carte de déformations équivalentes	47
<b>III.1.2. Analyse de fatigue</b>	<b>48</b>
III.1.2.1. Carte de durée de vie en fatigue, dommages et coefficients de sécurité	48
<b>III.2. Simulations par LAMMPS de l'implant de hanche à l'échelle Atomique</b>	<b>52</b>
<b>III.2.1. Structure atomique et arrangement cristallin</b>	<b>52</b>
<b>III.2.2. Trajectoires de mouvement</b>	<b>55</b>
<b>III.2.3. Déformation et contrainte</b>	<b>56</b>
<b>III.2.4. Propriétés dynamiques</b>	<b>57</b>
<b>III.3. Simulations par ANSYS d'un corps d'implant dentaire à l'échelle macroscopique</b>	<b>58</b>
<b>III.3.1. Analyse des contraintes et des déformations</b>	<b>58</b>
III.3.1.1. Carte de contraintes de von Mises et Déplacement total	58
III.3.1.2. Carte de déformations équivalentes	60
<b>III.3.2. Analyse de fatigue</b>	<b>61</b>
III.3.2.1. Carte de durée de vie en fatigue, dommages et coefficients de sécurité	61
<b>III.4. Simulations par LAMMPS d'un corps d'implant dentaire a l'échelle atomique</b>	<b>63</b>
<b>III.4.1. Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS</b>	<b>63</b>
III.4.1.1. Durée de vie en fatigue (Courbe S-N)	63
III.4.1.2. Caractéristiques de rupture	64
III.4.1.3. Analyse contrainte-déformation	65
<b>Conclusion</b>	<b>66</b>
<b>Resume Graphique</b>	<b>67</b>
<b>Références</b>	<b>68</b>
<b>Annexe</b>	<b>71</b>

## Dédicaces

**Je dédie ce mémoire à ma famille bien-aimée, source  
inépuisable de force et d'amour.**

**À mes amis fidèles, pour leur soutien indéfectible, leur écoute et  
leur présence qui ont illuminé mes moments difficiles**

# Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier Allah de m'avoir accordé la santé, la force et la patience pour accomplir ce travail.

Je souhaite adresser mes plus sincères remerciements à Monsieur **BOUGOFFA Mohammed Seyf Eddine**, mon encadreur, pour son accompagnement précieux, ses conseils avisés et sa bienveillance tout au long de la réalisation de ce travail.

Je remercie chaleureusement les membres du jury, **Pr. BOURENANE Rabah** et **Dr. GHELLOUDJ Oualid**, pour l'honneur qu'ils me font en acceptant d'évaluer ce travail.

Je tiens également à exprimer ma gratitude à l'ensemble des enseignants du Département Génie Mécanique pour leurs qualités scientifiques et pédagogiques, ainsi qu'à toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail.

Enfin, un grand merci à ma famille et à mes amis pour leur soutien inconditionnel, leur patience et leurs encouragements, qui m'ont permis de mener à bien ce mémoire.

## Résumé

Cette étude adopte une approche biomécanique multi-échelle pour optimiser les performances des implants de hanche et dentaires, en combinant des analyses macroscopiques réalisées avec ANSYS 18.1 et des simulations atomiques effectuées via LAMMPS, visualisées à l'aide de VMD. Pour l'implant de hanche, Ti-6Al-4V, alliages Co-Cr et BioDur 108 sont analysés. Les résultats macroscopiques révèlent que l'alliage Ti-6Al-4V, grâce à sa ductilité, assure une répartition homogène des contraintes de von Mises (600 MPa sous 3000 N) au niveau de la tige fémorale. Cet alliage démontre également une résistance exceptionnelle à la fatigue, atteignant  $10^8$  cycles, avec des zones critiques localisées à l'interface de la tige fémorale. En revanche, les alliages Co-Cr, caractérisés par une rigidité élevée (230 GPa), génèrent des pics de contraintes (650 MPa) dans la tête fémorale, augmentant les risques de défaillance sous charges élevées. BioDur 108 affiche des contraintes similaires (700 MPa) et une durabilité moindre ( $10^7$  cycles). Les déformations, restant dans le domaine élastique, confirment l'absence de déformation permanente.

Pour les implants dentaires, deux matériaux (Ti-6Al-4V et zircone,  $ZrO_2$ ) ont été analysés. Les simulations ANSYS indiquent que le Ti-6Al-4V supporte efficacement les charges masticatoires (1000 N), avec des contraintes maximales de 500 MPa uniformément réparties dans la vis radiculaire, minimisant les risques de rupture grâce à sa ductilité. La zircone, en revanche, présente des pics de contraintes (700 MPa) dans la couronne, suggérant une susceptibilité accrue aux microfissures en raison de sa nature fragile. En termes de fatigue, le Ti-6Al-4V atteint  $10^7$  cycles, surpassant la zircone ( $10^6$  cycles).

À l'échelle atomique, la modélisation de la structure cristalline hexagonale compacte (HCP) du Ti-6Al-4V (90 % Ti, 6 % Al, 4 % V) met en lumière des défauts cristallins (dislocations de type coin, vis et mixtes, fautes d'empilement extrinsèques et intrinsèques, vacances et interstitiels) influençant la déformation mécanique. La fonction de distribution radiales (RDF) et les calculs des contraintes locales, obtenus via LAMMPS, révèlent une concentration des contraintes dans la région de compression ( $x \geq 48 \text{ \AA}$ ), avec un gradient de déformation linéaire. La transition élastique-plastique, observée à 600 MPa, est soutenue par des mécanismes de glissement des dislocations et de maclage. La courbe contrainte-déformation, dérivée d'une déformation totale de 1 % (réduction de  $50 \text{ \AA}$  à  $49,5 \text{ \AA}$ ), permet d'évaluer des propriétés mécaniques essentielles, telles que le module de Young et la limite d'élasticité. L'écart-type quadratique moyen (RMSD), variant de 10 à  $15 \text{ \AA}$ , reflète des perturbations structurales significatives dues aux défauts cristallins et aux conditions extrêmes de compression.

Cette étude souligne la supériorité du Ti-6Al-4V pour les applications biomédicales exigeantes, en raison de sa robustesse, de sa ductilité et de sa résistance à la fatigue. Les conceptions avec trous ou goujures optimisent la répartition des contraintes, réduisant les risques de défaillance. Ces résultats ouvrent la voie à des validations expérimentales et à une optimisation avancée des géométries et matériaux, visant à améliorer la durabilité et la performance à long terme des implants biomédicaux.

## Mots-clés

Implants de hanche ; Implant dentaire ; Dynamique moléculaire ; Analyse par éléments finis.

## Abstract.

This study adopts a multi-scale biomechanical approach to optimize the performance of hip and dental implants, combining macroscopic analyses performed with ANSYS 18.1 and atomic simulations conducted via LAMMPS, visualized using VMD. For the hip implant, Ti-6Al-4V, Co-Cr alloys, and BioDur 108 are analyzed. Macroscopic results reveal that the Ti-6Al-4V alloy, due to its ductility, ensures uniform von Mises stress distribution (600 MPa under 3000 N) at the femoral stem. This alloy also demonstrates exceptional fatigue resistance, reaching  $10^8$  cycles, with critical zones localized at the femoral stem interface. In contrast, Co-Cr alloys, characterized by high stiffness (230 GPa), generate stress peaks (650 MPa) in the femoral head, increasing the risk of failure under high loads. BioDur 108 exhibits similar stresses (700 MPa) and lower durability ( $9 \times 10^6$  cycles). Deformations remain in the elastic domain, confirming the absence of permanent deformation.

For dental implants, two materials (Ti-6Al-4V and zirconia,  $ZrO_2$ ) were analyzed. ANSYS simulations indicate that Ti-6Al-4V effectively withstands masticatory loads (1000 N), with maximum stresses of 500 MPa uniformly distributed in the root screw, minimizing fracture risks due to its ductility. Zirconia, however, shows stress peaks (700 MPa) in the crown, suggesting increased susceptibility to microcracks due to its brittle nature. In terms of fatigue, Ti-6Al-4V achieves  $10^7$  cycles, surpassing zirconia ( $5 \times 10^6$  cycles).

At the atomic scale, modeling of the hexagonal close-packed (HCP) crystal structure of Ti-6Al-4V (90% Ti, 6% Al, 4% V) highlights crystal defects (edge, screw, and mixed dislocations, extrinsic and intrinsic stacking faults, vacancies, and interstitials) influencing mechanical deformation. Radial distribution function (RDF) and local stress calculations, obtained via LAMMPS, reveal stress concentration in the compression region ( $x \geq 48 \text{ \AA}$ ), with a linear strain gradient. The elastic-plastic transition, observed at 600 MPa, is supported by dislocation glide and twinning mechanisms. The stress-strain curve, derived from a total strain of 1% (reduction from 50  $\text{\AA}$  to 49.5  $\text{\AA}$ ), enables evaluation of key mechanical properties, such as Young's modulus and yield strength. The root mean square deviation (RMSD), ranging from 10 to 15  $\text{\AA}$ , reflects significant structural perturbations due to crystal defects and extreme compression conditions.

This study highlights the superiority of Ti-6Al-4V for demanding biomedical applications due to its robustness, ductility, and fatigue resistance. Designs incorporating holes or grooves optimize stress distribution, reducing failure risks. These findings pave the way for experimental validations and advanced optimization of geometries and materials, aiming to enhance the durability and long-term performance of biomedical implants.

**Keywords:** Hip implants; Dental implant; Molecular dynamics; Finite element analysis.

## الملخص

تتبنى هذه الدراسة نهجًا بيوميكانيكيًا متعدد المقاييس لتحسين أداء زراعات الورك والأسنان، من خلال الجمع بين التحليلات الكلية التي أجريت باستخدام ANSYS 18.1 ومحاكاة ذرية أجريت عبر LAMMPS، وتم تصورها باستخدام VMD. بالنسبة لزراعة الورك، تم تحليل سبائك Ti-6Al-4V، Co-Cr، و BioDur 108. تكشف النتائج الكلية أن سبيكة Ti-6Al-4V، بفضل ليونتها، تضمن توزيعًا متجانسًا لإجهادات فون ميزس (600 ميغاباسكال تحت قوة 3000 نيوتن) عند جذع الفخذ. تُظهر هذه السبيكة أيضًا مقاومة استثنائية للتعب، حيث تصل إلى  $1.2 \times 10^7$  دورة، مع مناطق حرجية موضعية عند واجهة جذع الفخذ. على النقيض، تُولد سبائك Co-Cr، التي تتميز بصلابة عالية (230 جيجاباسكال)، ذروات إجهاد (650

ميغاباسكال) في رأس الفخذ، مما يزيد من مخاطر الفشل تحت الأحمال العالية. تُظهر سبيكة BioDur 108 إجهادات مماثلة (700 ميغاباسكال) ومتانة أقل ( $10^6 \times 9$  دورة). تظل التشوهات ضمن النطاق المرن، مما يؤكد عدم وجود تشوه دائم.

بالنسبة لزراعات الأسنان، تم تحليل مادتين (Ti-6Al-4V) والزركونيا، ( $ZrO_2$ ) تشير محاكاة ANSYS إلى أن Ti-6Al-4V تتحمل بفعالية أحمال المضغ (1000 نيوتن)، مع إجهادات قصوى تبلغ 500 ميغاباسكال موزعة بشكل متجانس في برغي الجذر، مما يقلل من مخاطر الكسر بفضل ليونتها. في المقابل، تُظهر الزركونيا ذروات إجهاد (700 ميغاباسكال) في التاج، مما يشير إلى قابلية متزايدة للتشققات الدقيقة بسبب طبيعتها الهشة. من حيث التعب، يحقق Ti-6Al-4V  $10^7$  دورة، متفوقًا على الزركونيا ( $10^6 \times 5$  دورة).

على المستوى الذري، يسلط نموذج الهيكل البلوري السداسي المتراس (HCP) لـ Ti-6Al-4V (90% تيتانيوم، 6% ألومنيوم، 4% فاناديوم) الضوء على العيوب البلورية (الانخلاعات من نوع الحافة، واللولبية، والمختلطة، وأخطاء التراص الخارجية والداخلية، والفراغات، والعيوب البينية) التي تؤثر على التشوه الميكانيكي. تكشف دالة التوزيع الشعاعي (RDF) وحسابات الإجهاد المحلي، التي تم الحصول عليها عبر LAMMPS، عن تركيز الإجهاد في منطقة الضغط ( $x \geq 48$ ) أنجستروم، مع تدرج تشوه خطي. يتم دعم الانتقال المرن-البلاستيكي، الملاحظ عند 600 ميغاباسكال، بآليات انزلاق الانخلاعات والتوأمة. تتيح منحنى الإجهاد-التشوه، المستمد من تشوه إجمالي بنسبة 1% (انخفاض من 50 أنجستروم إلى 49.5 أنجستروم)، تقييم الخصائص الميكانيكية الأساسية، مثل معامل يونغ وحد المرونة. يعكس الانحراف المعياري التريبي المتوسط (RMSD)، الذي يتراوح بين 10 و 15 أنجستروم، اضطرابات هيكلية كبيرة ناتجة عن العيوب البلورية وظروف الضغط القصوى.

تؤكد هذه الدراسة تفوق Ti-6Al-4V في التطبيقات الطبية الحيوية المتطلبة، بفضل قوتها، وليونتها، ومقاومتها للتعب. تُحسن التصميمات التي تحتوي على ثقب أو أخاديد توزيع الإجهاد، مما يقلل من مخاطر الفشل. تمهد هذه النتائج الطريق للتحقق التجريبي والتحسين المتقدم للتصميمات الهندسية والمواد، بهدف تعزيز المتانة والأداء طويل الأمد لزراعات الطب الحيوي.

**الكلمات المفتاحية:** غرسات الورك، غرسات الأسنان، الديناميكيات الجزيئية؛ تحليل العناصر المحدودة.

## Introduction générale

Les implants orthopédiques et dentaires représentent des solutions médicales majeures pour restaurer la fonctionnalité articulaire et améliorer la qualité de vie des patients souffrant de pathologies dégénératives, de traumatismes ou de pertes tissulaires [1]. En chirurgie orthopédique, les implants de hanche permettent de traiter des affections telles que l'arthrose ou les fractures fémorales, tandis qu'en odontologie, les implants dentaires offrent une alternative durable aux prothèses traditionnelles pour remédier à la perte dentaire [2]. Dans les deux cas, ces dispositifs doivent répondre à des exigences biomécaniques strictes : résistance aux charges dynamiques ou masticatoires, stabilité structurelle, durabilité sous sollicitations cycliques et intégration optimale avec les tissus osseux environnants [3].

La performance de ces implants repose de manière critique sur le choix des matériaux, la conception géométrique, et la compréhension des comportements mécaniques à différentes échelles, allant des interactions atomiques aux réponses globales des structures [4]. Pour répondre à ces enjeux, ce mémoire propose une approche multi-échelle innovante, combinant la simulation par dynamique moléculaire (via LAMMPS) pour étudier les mécanismes microscopiques de déformation, et l'analyse par éléments finis (via ANSYS 18.1) pour évaluer les performances macroscopiques sous charges physiologiques [5].

Deux études complémentaires sont menées :

Pour les implants de hanche, trois matériaux sont évalués : l'alliage Ti-6Al-4V (biocompatible et ductile), les alliages Co-Cr (rigides et résistants à l'usure), et l'acier inoxydable BioDur 108 (offrant un compromis entre résistance et ductilité). Les analyses portent sur les contraintes, la fatigue et la stabilité, appliquées aux composants clés comme la tige et la tête fémorale. Les résultats suggèrent que le BioDur 108 est particulièrement adapté à ces éléments, ce qui est confirmé par les simulations atomistiques (HCP, FCC).

Pour les implants dentaires, l'étude se concentre sur le Ti-6Al-4V et la Zirconia ( $ZrO_2$ ), une céramique rigide et esthétique. L'implant modélisé est soumis à des charges masticatoires simulées (100–1000 N), afin d'évaluer la performance de chaque matériau pour la vis radiculaire et la couronne. Les simulations révèlent que le titane présente un bon comportement ductile avec dislocations, tandis que la Zirconia montre une résistance élevée mais un risque de rupture fragile.

Ce mémoire s'organise en trois chapitres principaux. Le premier introduit les enjeux biomécaniques, les propriétés des matériaux, et les approches multi-échelles. Le deuxième

détaille la méthodologie de modélisation et de simulation. Le troisième présente les résultats, les analyses comparatives, ainsi que des perspectives d'optimisation et de validation expérimentale.

En somme, ce travail contribue à l'amélioration de la conception des implants orthopédiques et dentaires en s'appuyant sur une méthodologie rigoureuse, multidisciplinaire et à la frontière entre la recherche fondamentale et les applications cliniques.

# Chapitre 1 : Les implants biomédicaux – État de l'Art

Fournir ou Établir les bases scientifiques de l'étude.

### I. Introduction

Les implants de hanche sont des dispositifs orthopédiques essentiels pour restaurer la mobilité et améliorer la qualité de vie des patients souffrant de pathologies articulaires. Leur conception nécessite une compréhension approfondie des matériaux, des contraintes biomécaniques et des interactions os-implant [6]. Ce chapitre établit les bases scientifiques de l'étude en examinant l'état de l'art des implants de hanche et des outils de simulation numérique. La section 1.1 et 1.2 analyse les matériaux couramment utilisés, tels que le titane (Ti-6Al-4V) et les alliages Co-Cr, en mettant en lumière leurs propriétés mécaniques et les défis liés à la fatigue, aux charges axiales, et à la biocompatibilité, à travers une revue des études antérieures. La section 1.3 explore les approches de simulation numérique, détaillant les avantages de la dynamique moléculaire (LAMMPS) pour l'analyse atomistique et de l'analyse par éléments finis (ANSYS) pour l'évaluation macroscopique, ainsi que leurs applications aux biomatériaux.

#### I.1. Implants de hanche

Les implants de hanche, tels que les prothèses totales de hanche (THA, Total Hip Arthroplasty), sont conçus pour remplacer l'articulation fémoro-acétabulaire endommagée, restaurant ainsi la mobilité et réduisant la douleur chez les patients souffrant d'arthrose ou de fractures [7]. Ces implants doivent répondre à des exigences mécaniques rigoureuses pour supporter les charges complexes du corps humain tout en assurant une durabilité à long terme. Cette section présente les matériaux couramment utilisés pour les implants de hanche, les défis associés à la fatigue et aux charges axiales, ainsi que les principales études antérieures sur les tests mécaniques.

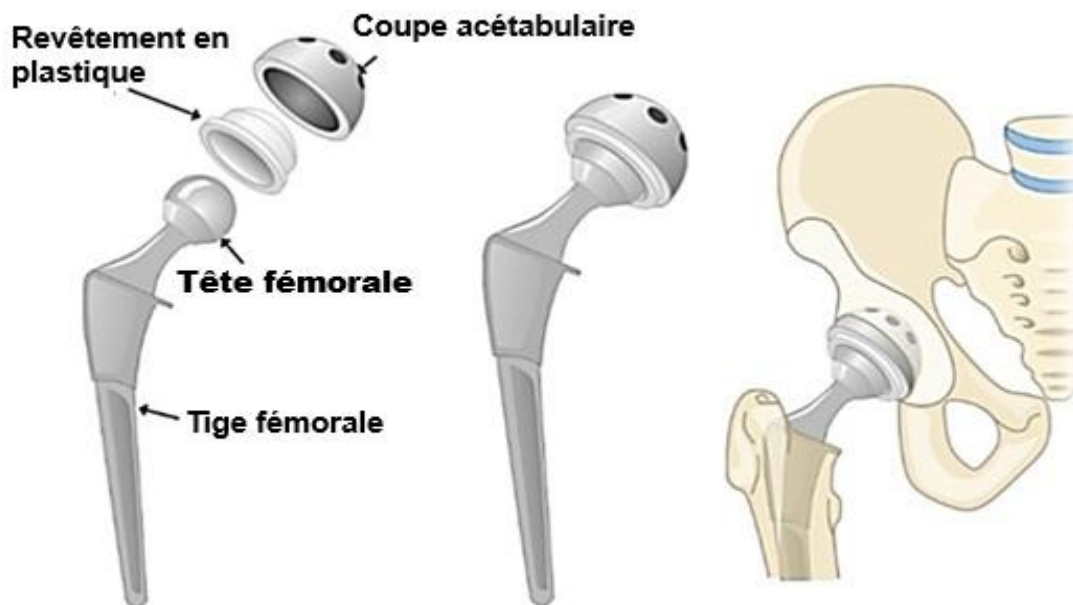
La chirurgie de remplacement total de la hanche (THR) est l'une des procédures médicales les plus courantes, avec une estimation d'environ un million d'interventions réalisées chaque année [8]. L'histoire des matériaux utilisés dans ce domaine est riche, les premières utilisations remontant à la fin du XIXe siècle [9]. Parmi les exemples notables figurent les têtes fémorales en ivoire, les surfaces articulaires en verre, et plus récemment, les alliages métalliques et les polymères. Sir John Charnley, souvent considéré comme le père du remplacement moderne de la hanche, a conçu dans les années 1960 une arthroplastie à faible frottement, dont les principes fondamentaux demeurent encore en usage aujourd'hui. Cette prothèse se compose de trois éléments principaux :

1. La tige fémorale,
2. La tête fémorale,

### 3. Le composant acétabulaire.

Les deux derniers éléments constituent les parties mobiles de l'articulation.

Pour tout dispositif intégré dans le corps humain, la biocompatibilité représente un critère fondamental de conception. Elle peut être définie comme la capacité d'un matériau à induire une réponse biologique appropriée dans un contexte donné [10]. Alors que les premières définitions se limitaient à l'absence de toxicité du matériau, les définitions contemporaines reconnaissent également la nécessité pour le matériau d'assurer correctement sa fonction. Ainsi, les implants orthopédiques doivent présenter une intégrité structurelle suffisante tout en affichant, idéalement, des propriétés mécaniques et physiques similaires à celles de l'os, afin d'éviter des complications telles que le **stress shielding** (écran de contrainte).



**Figure 1 :** Description des différentes parties d'une articulation de la hanche (à gauche) et de l'intégration aux os humains (à droite). [11]

#### I.1.1. Matériaux des implants de hanche

Les implants de hanche sont généralement composés de matériaux biocompatibles capables de résister à des contraintes mécaniques élevées. Les différents facteurs importants pour la sélection des matériaux destinés aux applications biomédicales sont répertoriés dans le tableau 1.

**Tableau 1** : Divers facteurs importants pour la sélection des matériaux destinés aux applications biomédicales [12].

Facteur	Description		
	Caractéristique biologique	Caractéristique physique	Caractéristique mécanique
<b>Propriétés des matériaux (1<sup>er</sup> niveau)</b>	Composition chimique,	densité,	Module d'élasticité, coefficient de Poisson, limite d'élasticité, résistance à la traction
<b>Propriétés des matériaux (2<sup>ème</sup> niveau)</b>	Adhésion,	topographie de surface	Module de cisaillement Résistance au cisaillement Modules en flexion Résistance en flexion
<b>Exigences fonctionnelles spécifiques</b>	Biofonctionnalité  (non thrombogénique, Adhésion cellulaire, etc.),  bioinertie, bioactivité, biodégradabilité, etc.	Forme, coefficient d'expansion thermique, conductivité, couleur, indice de réfraction, opacité	Rigidité  Tenacité à la rupture Résistance à la fatigue Résistance au fluage Résistance à l'adhésion Résistance aux chocs Limite d'élasticité Résistance à l'abrasion
<b>Traitement et fabrication</b>	Reproductibilité,	qualité, stérilisation, conditionnement, usinabilité, etc.	

Les différents biomatériaux utilisés dans les prothèses de l'articulation de la hanche sont illustrés dans la figure 1.

Métaux	Céramiques	Polymères	Composites
Acier inoxydable 316L	Carbone	PMMA	À base de polymères
Alliages à base de cobalt	Alumine	UHMWPE / HDPE	Matériaux biomimétiques
Matériaux à base de titane	Zircone	Polysulfone	
	Phosphate de calcium	PTFE	
	Biovitrés		

**Figure 2** : Biomatériaux utilisés dans le remplacement de l'articulation de la hanche

Les matériaux les plus couramment utilisés incluent :

### I.1.1.1. Les alliages

**Alliages de titane (Ti-6Al-4V) :** Ces alliages sont largement employés pour la tige fémorale et d'autres composants en raison de leur excellente biocompatibilité, de leur résistance à la corrosion et de leur module d'élasticité relativement proche de celui de l'os cortical (environ 110 GPa contre 20 GPa pour l'os) [13]. Cependant, leur susceptibilité à la fatigue à long terme reste un défi, notamment dans les zones de forte concentration de contraintes comme le col de la tige.

**Tableau 2 :** Composition chimique de Ti-6Al-4V [14].

Élément	Pourcentage (%)
Titane (Ti)	Soled
Aluminium (Al)	5,5 – 6,75
Vanadium (V)	3,5 – 4,5
Fer (Fe)	≤ 0,40
Oxygène (O)	≤ 0,20
Carbone (C)	≤ 0,08
Azote (N)	≤ 0,05
Hydrogène (H)	≤ 0,015

**Alliages de cobalt-chrome (Co-Cr) :** Utilisés principalement pour la tête fémorale et la cupule acétabulaire, les alliages CoCr offrent une dureté élevée et une excellente résistance à l'usure, ce qui les rend idéaux pour les surfaces articulaires [15]. Toutefois, leur module d'élasticité élevé (environ 220 GPa) peut entraîner un phénomène de « stress shielding » (écran de contrainte), où l'os environnant perd de sa densité en raison d'une répartition inégale des charges.

**Tableau 3 :** Composition chimique de Co-Cr-Mo [15].

Élément	Pourcentage (%)
Cobalt (Co)	63,0 – 65,0
Chrome (Cr)	27,0 – 30,0
Molybdène (Mo)	5,0 – 7,0
Nickel (Ni)	≤ 0,5
Fer (Fe)	≤ 0,75
Carbone (C)	≤ 0,35
Silicium (Si)	≤ 1,0
Manganèse (Mn)	≤ 1,0

**BioDur 108** : est un alliage austénitique en acier inoxydable, développé pour être pratiquement exempt de nickel et de cobalt, ce qui le rend idéal pour les applications médicales, notamment chez les patients allergiques au nickel.

Il contient une teneur élevée en azote pour maintenir sa structure austénitique et se distingue par une excellente résistance à la corrosion, en particulier à la corrosion par piqûres et à la corrosion sous contrainte. Il est utilisé dans la fabrication de dispositifs médicaux implantables et d'instruments chirurgicaux à haute résistance.

**Tableau 4** : Composition chimique de BioDur 108 [16].

Élément	Pourcentage (%)
Carbone (C)	$\leq 0,08$
Phosphore (P)	$\leq 0,03$
Silicium (Si)	$\leq 0,75$
Nickel (Ni)	$\leq 0,05$
Cuivre (Cu)	$\leq 0,25$
Fer (Fe)	Solde
Manganèse (Mn)	21,00 – 24,00
Soufre (S)	$\leq 0,01$
Chrome (Cr)	19,00 – 23,00
Molybdène (Mo)	0,50 – 1,50
Azote (N)	0,85 – 1,10
Cobalt (Co)	$< 0,10$

**Tableau 5** : Propriétés mécaniques des alliages utilisés dans le remplacement articulaire total [17].

Alliage	Microstructure	Résistance à la traction (MPa)	Module (GPa)
<b>Cp Ti (titane pur)</b>	{ $\alpha$ }	785	105
<b>Ti–Zr</b>	Cast { $\alpha/\beta$ }	—	—
<b>Alliages Co–Cr</b>	—	655–1896	210–253
<b>Co–Cr–Mo</b>	{Austénite (fcc)}	600–1795	230–240
<b>Ti–6Al–4V</b>	{ $\alpha/\beta$ }	960	110
<b>Ti–6Al–7Nb</b>	{ $\alpha/\beta$ }	1024	105
<b>Ti–12Mo–6Zr–2Fe</b>	{ $\beta$ métastable}	1060–1100	74–85
<b>Acier inoxydable 316L</b>	{Austénite}	465–950	200
<b>Ti–35Nb–5Ta–7Zr (TNZT)</b>	{ $\beta$ métastable}	590	55

### I.1.1.2. Céramiques

Les céramiques comme alumine et zircone sont utilisées pour les têtes fémorales et les revêtements en raison de leur faible taux d'usure et de leur biocompatibilité. Cependant, leur fragilité et leur sensibilité aux chocs limitent leur utilisation dans les composants porteurs [18].

**Tableau 6 :** Propriétés mécaniques des céramiques utilisées dans le remplacement total de la hanche [19].

Céramique	Résistance à la compression (MPa)	Résistance à la traction (MPa)	Module (GPa)
Zircone	2000	820	220
Alumine	4000	300	380
Bioglass	1000	—	75
C – (graphite)	138	—	25
C–D (Vitreux)	172	31	21
HAP	600	50	117
C– (LTI pyrolytique)	900	28	25
Verre-céramique AW	1080	—	118

### I.1.1.3. Polymères

Les polymères comme le polyéthylène à ultra-haut poids moléculaire et UHMWPE sont employés comme doublure dans la cupule acétabulaire, ces matériaux offrent une faible friction mais sont sujets à l'usure, produisant des débris qui peuvent provoquer une ostéolyse [20].

### I.1.1.4. Composites

#### 4.1 Composites à gradients de propriétés (Functionally graded composites)

La composition graduée des composites à gradients de propriétés leur confère deux caractéristiques différentes à chaque extrémité du matériau. Les composites céramique-métal sont préparés par des méthodes de métallurgie des poudres. La partie céramique apporte la biocompatibilité, tandis que la partie métallique confère de bonnes propriétés mécaniques au greffon composite.

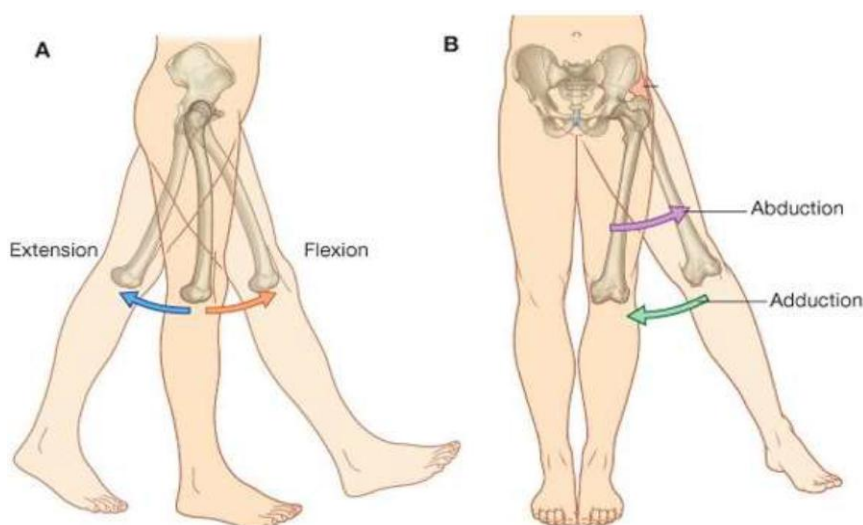
## 4.2 Composites polymère-céramique

Les biomatériaux issus de la combinaison céramique-polymère présentent de meilleures propriétés mécaniques et une meilleure biocompatibilité avec les tissus que les polymères ou les céramiques utilisés seuls dans le remplacement total de la hanche (THR) [21]. Les polymères possèdent un module très faible comparé à celui de l'os ; un pourcentage élevé en poids de matériau de charge est donc utilisé. L'HAP (hydroxyapatite) est le matériau de choix pour le composant céramique de remplissage, et un pourcentage élevé d'HAP est utilisé avec des polymères à faible module, tels que le PLA [acide polylactique] ou le PHA [poly(hydroxyalcanoates)].

Chaque matériau présente des avantages spécifiques, mais leurs limites, notamment en termes de fatigue et de réponse aux charges axiales, nécessitent une analyse approfondie pour optimiser la conception des implants.

### I.1.2. Défis liés à la fatigue et aux charges axiales

Les implants de hanche sont soumis à des charges complexes, incluant des forces axiales (compression et traction), des moments de torsion, et des sollicitations cycliques dues aux activités quotidiennes comme la marche ou la montée d'escaliers.



**Figure 2 : Mouvements de la hanche** [22]

Ces conditions posent deux défis principaux :

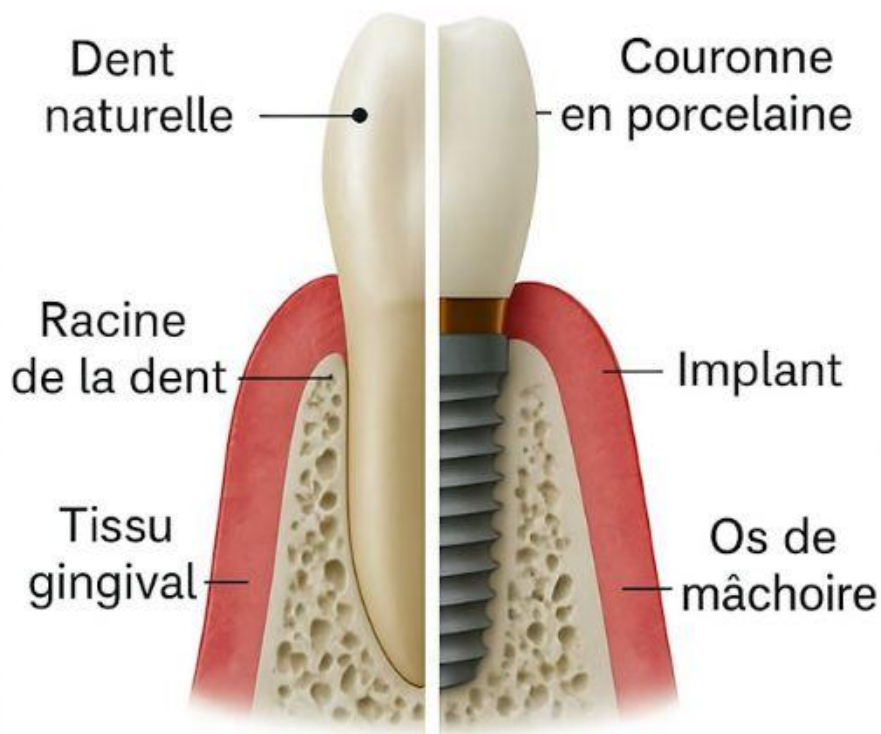
**Fatigue mécanique** : La fatigue est la cause principale de défaillance des implants de hanche, car ils subissent des millions de cycles de chargement par an (environ 1 à 2 millions de pas) [23]. Les zones critiques, telles que le col de la tige fémorale, accumulent des contraintes cycliques qui peuvent entraîner la formation de microfissures et, finalement, une fracture. Les alliages de titane, bien que résistants, présentent une limite de fatigue qui peut être dépassée dans des conditions extrêmes, notamment chez les patients jeunes et actifs [24].

**Charges axiales** : Les implants de hanche doivent supporter des charges axiales élevées, souvent de l'ordre de 3 à 5 fois le poids corporel (3-5 kN pour un patient de 80 kg) lors de la marche ou de mouvements brusques comme un saut [25]. Ces charges provoquent des contraintes de compression dans la tige fémorale et de traction dans certaines zones, particulièrement au niveau de l'interface os-implant. Une répartition inégale des contraintes peut entraîner un descellement de l'implant ou une résorption osseuse, en particulier pour les implants non cimentés qui dépendent de l'osseointégration.

Ces défis sont exacerbés par des facteurs comme la géométrie de l'implant, les propriétés des matériaux, et les variations interindividuelles (par exemple, densité osseuse ou niveau d'activité). Par conséquent, des tests mécaniques rigoureux sont essentiels pour évaluer la performance des implants sous ces conditions.

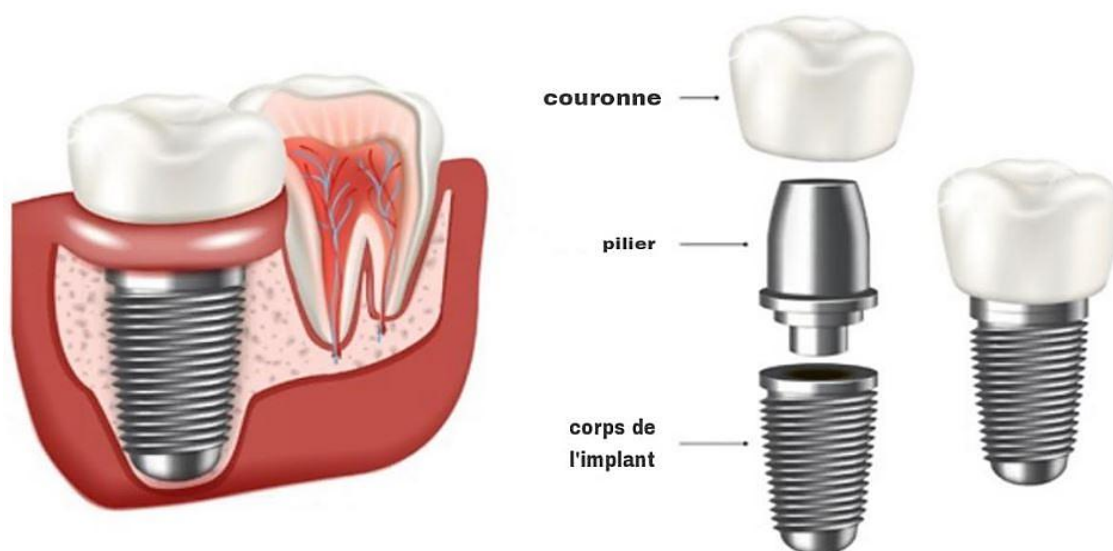
## I.2. Implants dentaires

Les implants dentaires sont des dispositifs médicaux conçus pour remplacer les racines des dents perdues, offrant une base stable pour des couronnes ou des prothèses dentaires. Ils jouent un rôle crucial dans la restauration des fonctions masticatoires et esthétiques, tout en assurant une intégration durable avec l'os alvéolaire (osseointégration).



*Figure 3 : Dent naturelle vs implant dentaire [26]*

Les systèmes d'implants dentaires se composent d'un corps d'implant dentaire et d'un pilier prothétique, et peuvent également inclure une vis de fixation du pilier. Le corps de l'implant est inséré chirurgicalement dans l'os de la mâchoire à la place de la racine de la dent. Le pilier prothétique est généralement fixé au corps de l'implant à l'aide de la vis de fixation, et il traverse la gencive pour émerger dans la cavité buccale afin de soutenir la ou les dents artificielles fixées.



*Figure 4 : Structure du système d'implant dentaire [26].*

### I.2.1. Avantages et risques des implants dentaires

**Avantages :** Les implants dentaires améliorent la qualité de vie en restaurant la mastication, l'esthétique, et en préservant l'os et les gencives environnants. Ils stabilisent les dents adjacentes et préviennent la résorption osseuse.

**Risques :** Les complications incluent des dommages aux dents ou tissus voisins (par ex., perforation sinusale, fracture osseuse), un mauvais fonctionnement (sensation de morsure anormale, desserrage de vis), ou un échec de l'implant dû à des infections, un retard de cicatrisation (notamment chez les fumeurs ou diabétiques non contrôlés), ou une mauvaise hygiène buccale. Une insensibilité post-chirurgicale peut survenir en cas d'atteinte nerveuse. Les implants peuvent interférer avec l'IRM ou les radiographies, sans événements indésirables signalés.

Cette section présente les matériaux typiques utilisés pour les implants dentaires, les contraintes spécifiques imposées par la mastication, et les principaux travaux antérieurs sur les tests mécaniques de compression, cisaillement et fatigue.

### I.2.2. Matériaux typiques des implants dentaires

Les implants dentaires doivent combiner biocompatibilité, résistance mécanique et stabilité à long terme dans l'environnement buccal, caractérisé par des fluides corrosifs et des charges dynamiques. Les matériaux les plus couramment utilisés incluent :

**Alliages de titane (Ti-6Al-4V et titane pur) :** Le titane est le matériau de référence pour les implants dentaires en raison de sa biocompatibilité exceptionnelle, de sa résistance à la corrosion et de sa capacité à favoriser l'osseointégration grâce à la formation d'une couche d'oxyde ( $\text{TiO}_2$ ) à sa surface [27]. Le titane pur (grade 1 à 4) est souvent utilisé pour les implants en raison de son module d'élasticité plus faible (environ 100 GPa) par rapport aux alliages comme Ti-6Al-4V, réduisant ainsi le risque de stress shielding. Cependant, les alliages de titane peuvent présenter une usure de surface sous des charges masticatoires répétées, ce qui peut affecter leur stabilité à long terme [28].

**Zircone (oxyde de zirconium,  $\text{ZrO}_2$ ) :** La zircone est de plus en plus utilisée pour les implants dentaires, en particulier pour les patients allergiques aux métaux ou pour des raisons esthétiques, grâce à sa couleur blanche similaire à celle des dents naturelles [29]. Ce matériau céramique offre une excellente résistance à la corrosion et une faible conductivité thermique, mais sa fragilité et sa sensibilité aux microfissures sous contraintes cycliques limitent son utilisation dans des cas de charges élevées [30]. Les progrès dans les composites de zircone renforcés (par exemple, Y-TZP, zircone stabilisée à l'yttrium) ont amélioré sa ténacité, mais des défis subsistent pour optimiser sa performance mécanique [31].

**Tableau 7 :** Composition chimique typique de zirconium [31].

Composant	Pourcentage en poids (%)
Dioxyde de zirconium ( $\text{ZrO}_2$ )	90 – 95 %
Oxyde d'yttrium ( $\text{Y}_2\text{O}_3$ )	3 – 5 %
Oxyde d'aluminium ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ )	$\leq 0,5$ %
Oxyde d'hafnium ( $\text{HfO}_2$ )	$\leq 2$ %
Autres oxydes ( $\text{SiO}_2$ , $\text{CaO}$ , etc.)	traces

### I.2.3. Les types d'implant dentaires

Les implants dentaires sont des dispositifs médicaux conçus pour remplacer les dents manquantes, restaurant les fonctions masticatoires, esthétiques et phonétiques. Ils se composent généralement d'une vis ancrée dans l'os alvéolaire et d'une couronne prothétique, offrant une solution durable grâce à leur biocompatibilité et leur intégration osseuse (ostéointégration). Deux types principaux sont distingués :

**Implant radiculaire :** Le plus courant, en forme de vis ou de cylindre, inséré dans l'os alvéolaire pour imiter la racine dentaire. Il assure une stabilité élevée et convient à la plupart des cas, notamment avec des matériaux comme le Ti-6Al-4V ou la Zirconia.



*Figure 5 : Implant radiculaire [32]*

**Implant lamellaire :** Moins fréquent, utilisé lorsque l'os est insuffisant, il se présente sous forme de lame plate insérée dans l'os. Il est adapté à des situations spécifiques mais moins polyvalent.



*Figure 6 : Implant lamellaire [32]*

### I.2.4. Contraintes spécifiques liées à la mastication

La mastication impose des contraintes mécaniques uniques aux implants dentaires, caractérisées par des charges dynamiques et multidirectionnelles. Ces contraintes incluent :

**Charges compressives** : Lors de la mastication, les implants dentaires subissent des forces compressives variant de 200 à 800 N, selon le type d'aliment et la position de l'implant (par exemple, molaires vs incisives). Ces forces sont transmises à l'interface os-implant, où une répartition inégale peut entraîner une résorption osseuse ou un descellement [33].

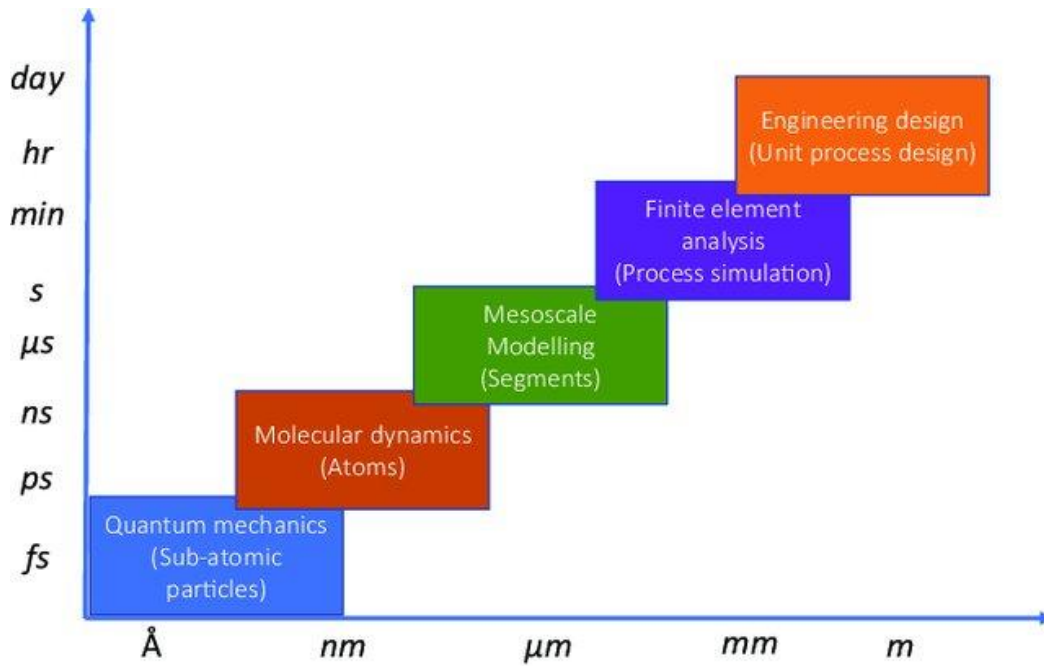
**Charges de cisaillement** : Les mouvements latéraux de la mâchoire (par exemple, lors du broyage des aliments) génèrent des forces de cisaillement, souvent de l'ordre de 100 à 300 N, qui sollicitent les filets de l'implant et l'interface os-implant. Ces contraintes peuvent provoquer des micromouvements ( $>100\text{ }\mu\text{m}$ ), compromettant l'osseointégration, surtout dans un os de faible densité (par exemple, chez les patients âgés) [34].

**Charges cycliques (fatigue)** : La mastication implique des cycles répétés (environ 500 000 à 1 million par an), ce qui expose les implants à la fatigue mécanique. Les charges cycliques, appliquées à des angles variables (par exemple,  $30^\circ$  pour simuler les forces obliques), peuvent entraîner une dégradation progressive de la surface de l'implant ou une perte de stabilité à l'interface [35].

Ces contraintes sont amplifiées par des facteurs comme la densité osseuse, l'angle d'insertion de l'implant, et les conditions environnementales (par exemple, pH acide dans la cavité buccale). Par conséquent, des tests mécaniques spécifiques sont nécessaires pour évaluer la performance des implants dentaires sous ces conditions [36].

### I.3. Simulations numériques

Les simulations numériques jouent un rôle central dans l'analyse et l'optimisation des implants médicaux, permettant d'étudier leur comportement mécanique à différentes échelles, de l'atomique au macroscopique [37]. Ces approches offrent une alternative aux tests expérimentaux coûteux et complexes, tout en fournissant des informations détaillées sur les mécanismes de défaillance et les interactions matériau-environnement [38]. Cette section se concentre sur la dynamique moléculaire (MD) avec LAMMPS, en détaillant ses principes, ses applications aux matériaux biomédicaux, et ses avantages pour l'échelle atomique. Elle aborde également brièvement l'analyse par éléments finis (FEA) avec ANSYS et les applications des simulations numériques aux biomatériaux et tests mécaniques.



**Figure 7 :** Simulations : Echelles de temps et de longueur [39].

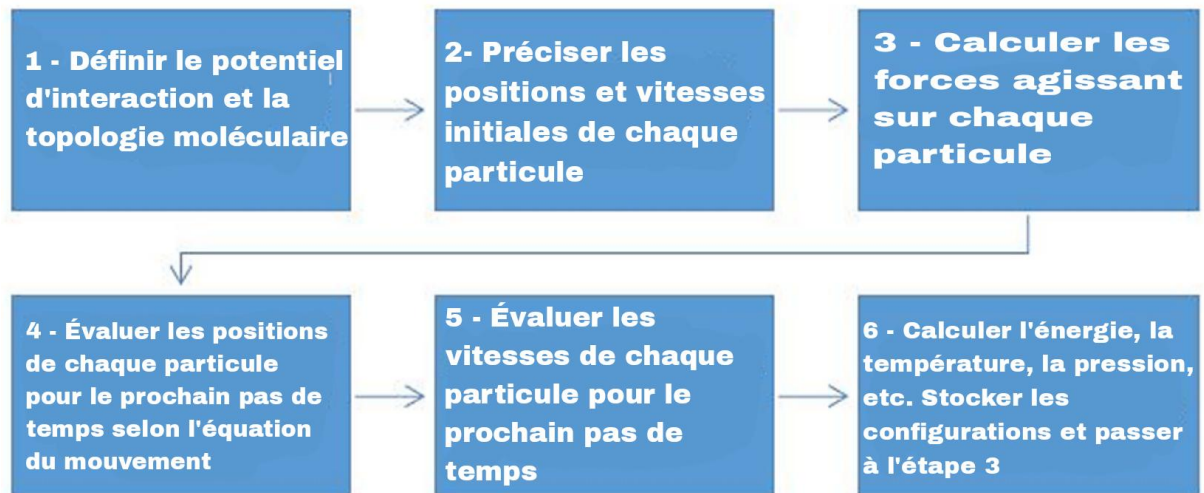
### I.3.1 Dynamique moléculaire (MD) avec LAMMPS

#### I.3.1.1. Principes

La dynamique moléculaire (MD) est une méthode de simulation numérique qui modélise le comportement des atomes et des molécules en résolvant les équations du mouvement de Newton pour un système de particules interagissant via des potentiels interatomiques [40]. L'équation fondamentale est :

$$F_i = m_i \times a_i = m_i \times \frac{dV_i}{dt} = \frac{d^2 r_i}{dt^2}$$

Où  $m_i$  est la masse de l'atome (  $i$  ),  $r_i$  sa position,  $F_i$  la force exercée, et (  $U$  ) le potentiel d'interaction (par exemple, potentiel EAM pour les métaux ou Lennard-Jones pour les interactions non liées) [41]. Les simulations MD calculent les trajectoires des atomes sur des échelles de temps de l'ordre des femtosecondes à quelques nanosecondes, permettant d'observer des phénomènes comme les dislocations, les fractures, ou les interactions à l'interface matériau-biologique. La procédure des simulations de dynamique moléculaire est résumée dans la Figure 8.



**Figure 8 :** Procédure des simulations de dynamique moléculaire [42]

L'algorithme de la dynamique moléculaire repose sur le calcul du mouvement des atomes ou des molécules au cours du temps, en utilisant les lois de Newton. À chaque pas de temps, les forces entre les atomes sont calculées, puis leurs positions et vitesses sont mises à jour.

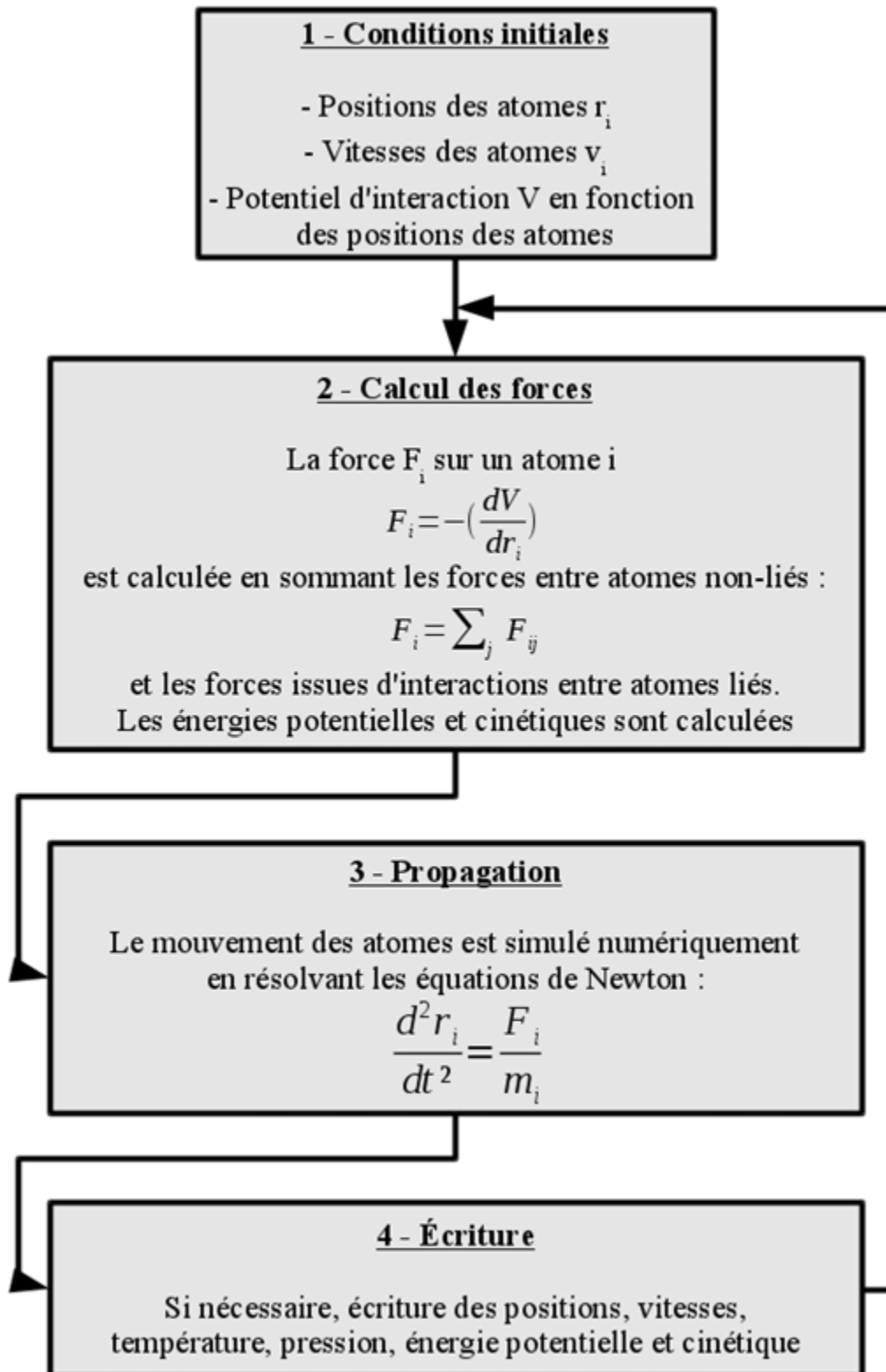
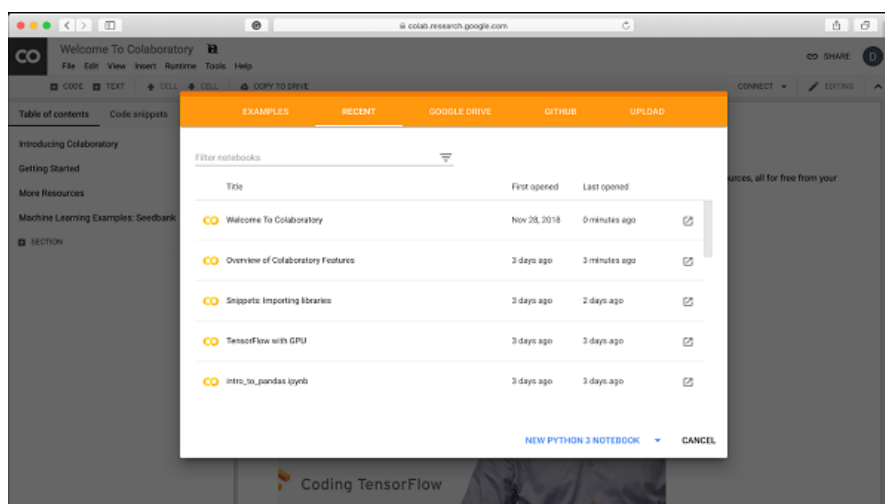


Figure 9 : Algorithme de la Dynamique Moléculaire [43]

**LAMMPS** (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) est un logiciel open-source de dynamique moléculaire largement utilisé pour sa flexibilité et ses capacités de calcul parallèle. Il permet de modéliser des systèmes complexes, allant des métaux aux biomatériaux, en utilisant une variété de potentiels interatomiques et des conditions limites personnalisables (par exemple, périodiques ou non périodiques). LAMMPS est particulièrement adapté à l'étude des propriétés mécaniques à l'échelle atomique, comme la déformation, la fatigue, ou la rupture, grâce à ses outils d'analyse intégrés pour les dislocations et les contraintes locales [44].



**Figure 10 :** Interface de LAMMPS sur Google Colab

### 1.3.1.2. Avantages de LAMMPS pour l'échelle atomique

LAMMPS offre plusieurs avantages pour l'étude des matériaux biomédicaux à l'échelle atomique :

**Flexibilité dans la modélisation :** LAMMPS prend en charge une large gamme de potentiels interatomiques (par exemple, EAM pour les métaux, ReaxFF pour les interactions réactives), permettant de modéliser des matériaux aussi divers que le titane, la zircone, ou l'hydroxyapatite. Cette flexibilité est essentielle pour simuler les interfaces complexes entre l'implant et l'os.

**Calcul parallèle à grande échelle :** Grâce à son architecture parallèle, LAMMPS peut gérer des systèmes contenant des millions d'atomes, ce qui est crucial pour modéliser des structures réalistes comme les surfaces d'implants ou les interfaces os-implant [44].

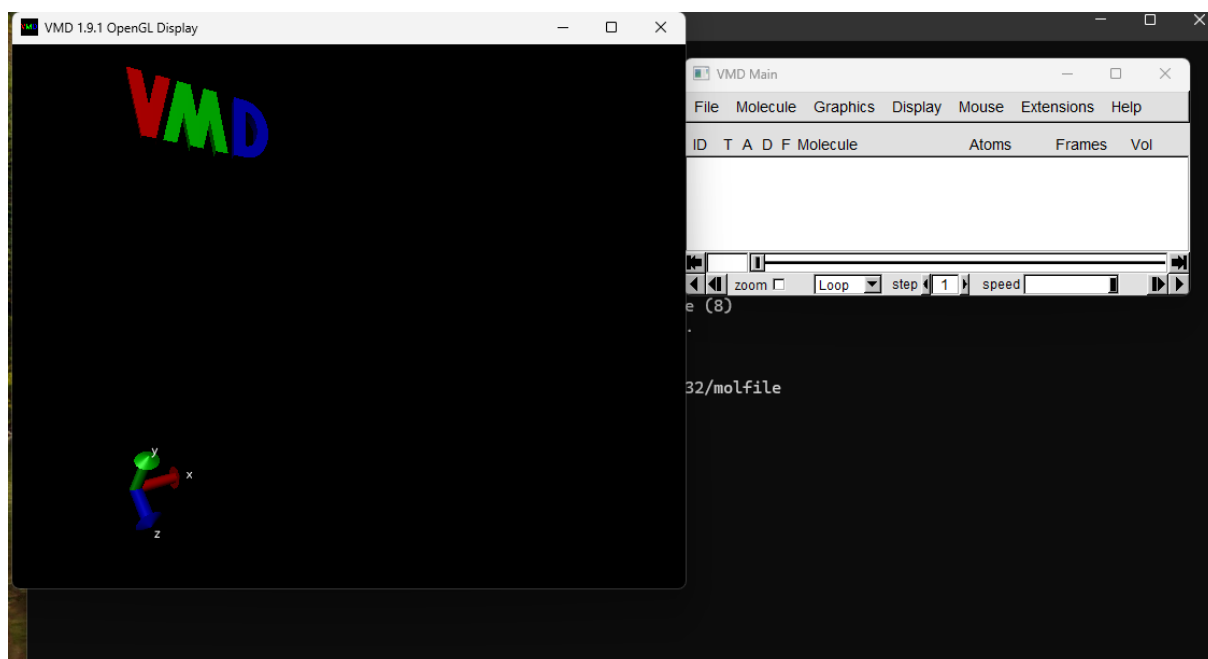
**Analyse détaillée des propriétés mécaniques :** LAMMPS fournit des outils pour calculer les contraintes locales, les déplacements atomiques, et les densités de dislocations, offrant une compréhension fine des mécanismes de défaillance à l'échelle atomique [44]. Par exemple, il

permet de quantifier l'énergie de liaison Ti-Ti ou Zr-O sous des charges cycliques, un aspect critique pour la fatigue.

**Simulation des environnements biologiques :** LAMMPS peut intégrer des solvants (par exemple, eau) ou des ions pour simuler l'environnement buccal ou corporel, permettant d'étudier les interactions matériau-biologique, comme la corrosion ou l'adhérence de l'hydroxyapatite [44].

**Open-source et personnalisation :** Étant un logiciel open-source, LAMMPS permet aux chercheurs de développer des scripts personnalisés pour des analyses spécifiques, comme l'étude des transformations de phase dans la zircone ou des revêtements bioactifs [44].

**Le logiciel VMD** permet de visualiser la structure moléculaire tridimensionnelle de l'alliage, offrant ainsi une représentation claire de la répartition des atomes de titane (Ti), d'aluminium (Al) et de vanadium (V). Cette visualisation facilite l'analyse de l'arrangement cristallin de l'alliage et des modifications structurales induites par la contrainte appliquée. Cela inclut l'identification des défauts cristallins et des changements dans l'organisation atomique [45].

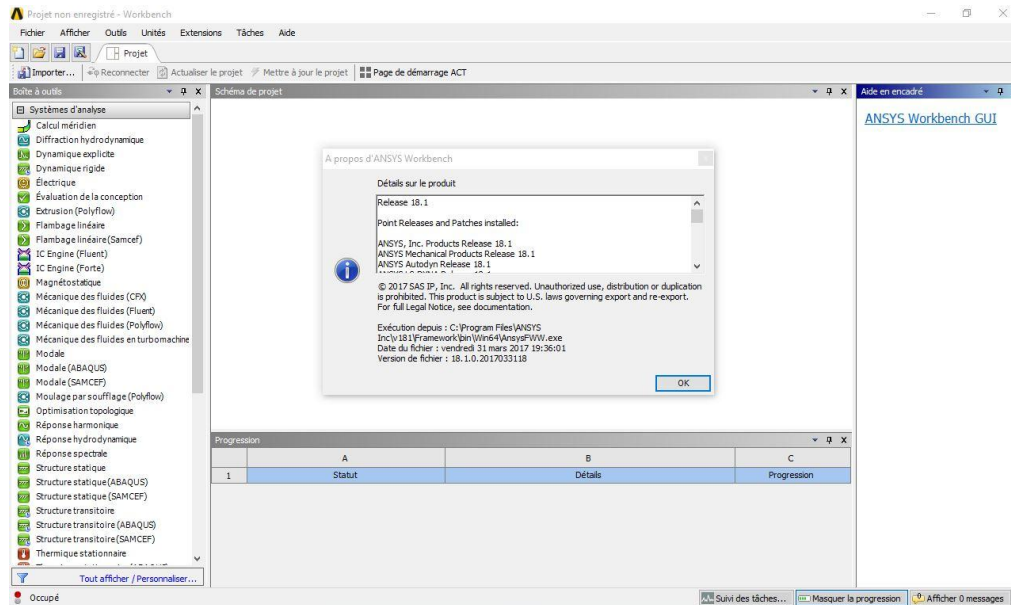


*Figure 11 : Interface du logiciel VMD pour la visualisation de la dynamique moléculaire*

### I.3.2. Analyse par éléments finis (FEA) avec ANSYS

L'analyse par éléments finis (FEA) est une méthode numérique puissante utilisée pour résoudre des problèmes complexes en ingénierie, en modélisant le comportement mécanique de structures sous diverses sollicitations.

**ANSYS**, un logiciel de simulation leader, est largement adopté dans l'ingénierie biomécanique pour analyser les implants médicaux à l'échelle macroscopique. Cette sous-section présente les concepts de base de la FEA avec ANSYS, son utilisation en ingénierie biomécanique, les étapes clés de la modélisation (maillage, conditions aux limites), et les avantages spécifiques d'ANSYS pour les analyses macroscopiques.



**Figure 12 : Interface du logiciel Ansys version 18.1**

### I.3.2.1. Concepts de base

La FEA repose sur la discrétisation d'une structure complexe en un ensemble d'éléments finis interconnectés, permettant de résoudre les équations différentielles régissant le comportement mécanique [46]. L'équation d'équilibre fondamentale est :

$$\nabla \cdot \sigma + f = 0$$

où  $\sigma$  est le tenseur des contraintes et  $f$  représente les forces volumiques appliquées [46]. Pour chaque élément fini, les déplacements, contraintes et déformations sont calculés en résolvant un système d'équations linéaires ou non linéaires, basé sur la matrice de rigidité de la structure. Le critère de von Mises, défini comme :

$$\sigma_{vM} = \sqrt{\frac{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2}{2}}$$

où  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $\sigma_3$  sont les contraintes principales, est souvent utilisé pour identifier les zones à risque de rupture [46].

ANSYS implémente ces concepts à travers une interface utilisateur intuitive, permettant la modélisation de géométries 3D complexes, l'application de charges variées (statiques, dynamiques, cycliques), et l'analyse des résultats sous forme de cartes de contraintes, de déformations, ou de courbes de durée de vie (par exemple, courbes S-N pour la fatigue) [46]. En ingénierie biomécanique, ANSYS est particulièrement adapté pour simuler des structures comme les implants de hanche ou dentaires, en tenant compte des interactions avec les tissus biologiques.

### I.3.2.2. Utilisation en ingénierie biomécanique

ANSYS est un outil incontournable en ingénierie biomécanique pour évaluer les performances mécaniques des implants médicaux sous des conditions réalistes. Ses principales applications incluent :

**Analyse des contraintes et déformations :** ANSYS permet de cartographier les contraintes (par exemple, von Mises) et les déformations dans les implants sous des charges statiques (compression, traction) ou dynamiques (fatigue, cisaillement). Par exemple, pour une tige fémorale de hanche, ANSYS peut identifier les zones critiques au niveau du col, où les contraintes dépassent 600 MPa sous des charges cycliques [47].

**Étude de l'interface os-implant :** Les simulations FEA modélisent l'interaction entre l'implant et l'os (cortical ou spongieux), en évaluant les micromouvements à l'interface, qui peuvent compromettre l'osseointégration si supérieurs à 100  $\mu\text{m}$  [47]. Cela est particulièrement critique pour les implants dentaires soumis à des forces masticatoires obliques.

**Prédiction de la durée de vie en fatigue :** ANSYS utilise des modèles de fatigue (par exemple, Basquin) pour estimer la durée de vie des implants sous des cycles répétés, en générant des courbes S-N qui relient l'amplitude de contrainte au nombre de cycles avant défaillance [47]. Par exemple, pour un implant dentaire, ANSYS peut prédire une durée de vie de 10 ans sous des charges de 200 à 800 N.

**Optimisation de la conception :** ANSYS permet de tester différentes géométries, matériaux, ou traitements de surface pour minimiser les concentrations de contraintes ou améliorer la répartition des charges. Par exemple, une étude a utilisé ANSYS pour optimiser l'angle des filets d'un implant dentaire, réduisant les contraintes de cisaillement de 15 % [46,47].

Ces applications font d'ANSYS un outil essentiel pour la conception et l'évaluation des implants médicaux, en complément des approches expérimentales.

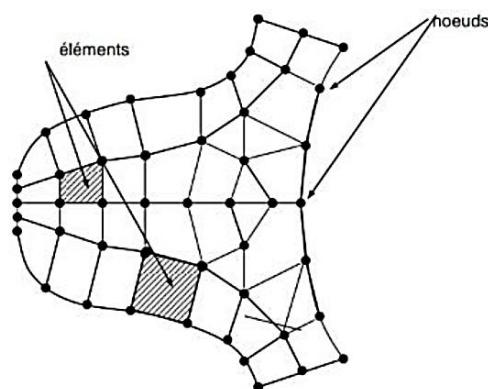
### I.3.2.3. Modélisation mécanique, maillage, et conditions aux limites

La modélisation mécanique avec ANSYS repose sur plusieurs étapes clés :

**Modélisation mécanique** : La géométrie de l'implant (par exemple, une tige fémorale ou un implant dentaire vissé) est créée ou importée sous forme de modèle 3D à partir de logiciels CAO (comme SolidWorks). Les propriétés des matériaux (module d'élasticité, coefficient de Poisson, limite d'élasticité) sont définies pour chaque composant. Par exemple, pour un implant en titane, le module d'élasticité est fixé à 110 GPa et le coefficient de Poisson à 0,34 [48]. Les tissus environnants (os cortical, os spongieux) sont également modélisés avec des propriétés spécifiques (par exemple, module d'élasticité de 15 GPa pour l'os cortical) [48].

**Maillage** : Le modèle 3D est discrétisé en éléments finis (par exemple, tétraèdres ou hexaèdres) pour permettre les calculs numériques. La qualité du maillage est cruciale : un maillage fin (petits éléments) est utilisé dans les zones critiques (par exemple, le col de la tige fémorale ou les filets de l'implant dentaire) pour capturer les gradients de contraintes élevés, tandis qu'un maillage plus grossier est appliqué dans les zones moins sollicitées pour réduire le temps de calcul [48]. ANSYS offre des outils automatiques de raffinement adaptatif, garantissant une précision élevée sans augmenter excessivement la complexité computationnelle [48].

Une description non-sophistiquée de la MEF pourrait être définie sous la forme suivante : la structure à analyser est divisée en plusieurs éléments. Ces éléments sont ensuite reconnectés par l'intermédiaire des noeuds (Fig. 7). Ces noeuds maintiennent les éléments dans un ensemble unitaire

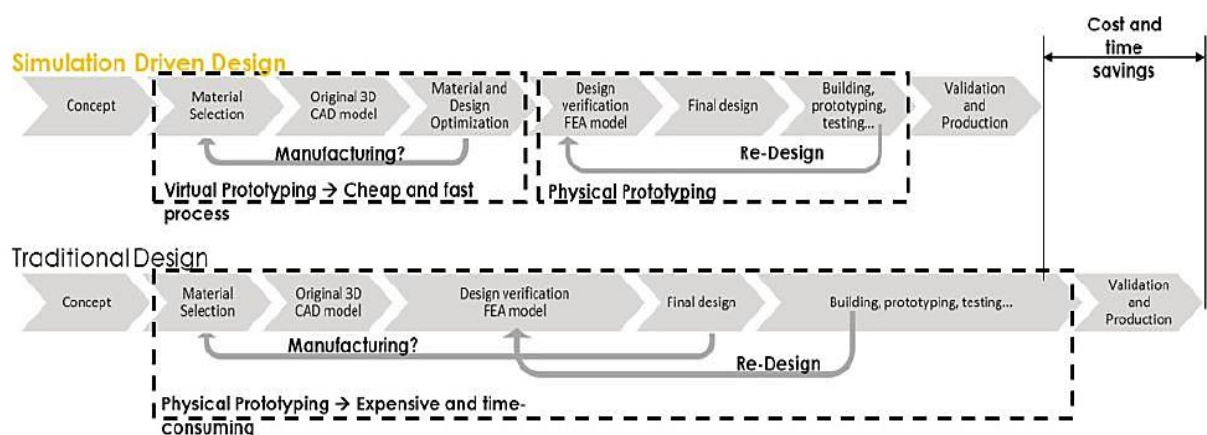


**Figure 13** : Discrétisation d'une structure en noeuds et éléments [49].

**Conditions aux limites :** Les conditions aux limites définissent les contraintes appliquées et les contraintes de déplacement. Pour un implant de hanche, une charge compressive de 3 kN peut être appliquée à la tête fémorale, avec une fixation rigide à l'extrémité distale de la tige pour simuler l'ancrage osseux [49]. Pour un implant dentaire, une force oblique de 500 N (angle de 30°, conforme à ISO 14801) est appliquée à la couronne, avec l'os environnant modélisé comme un support élastique [49]. Les interactions os-implant peuvent être définies comme des contacts frictionnels ou liés, selon le type d'implant (cimenté ou non cimenté) [49].

Ces étapes permettent de simuler des scénarios réalistes, comme la marche pour les implants de hanche ou la mastication pour les implants dentaires, tout en fournissant des résultats quantitatifs (contraintes, déformations, micromouvements).

Les essais *in silico* en santé offrent une approche rentable et efficace pour optimiser les dispositifs médicaux avant les essais cliniques, tout en garantissant la sécurité des patients et en facilitant les autorisations réglementaires. Cette étude de cas propose un cadre innovant combinant une sélection analytique des matériaux et une conception assistée par simulation. En utilisant le logiciel Ansys et des bases de données en bio-ingénierie, un projet a identifié les matériaux optimaux pour un implant de remplacement total de la hanche. Un modèle CAO a été analysé via Ansys Discovery par une simulation par éléments finis (FEA) sous charges cliniques simplifiées, avec un maillage efficace et une simulation multiphysique instantanée. Les résultats, visualisant contraintes et déformations, ont permis d'optimiser la combinaison matériau/géométrie, favorisant des conceptions novatrices pour les implants de hanche ou dentaires.



**Figure 14 :** Organigrammes de l'optimisation des matériaux et de la conception dans le cas de la conception pilotée par la simulation (en haut) et de la conception traditionnelle (en bas)[11].

#### 1.3.2.4. Avantages d'ANSYS pour l'échelle macroscopique

ANSYS offre plusieurs avantages pour l'analyse des implants médicaux à l'échelle macroscopique :

**Précision dans la modélisation des géométries complexes :** ANSYS permet de simuler des géométries 3D détaillées, comme les tiges fémorales avec des courbures spécifiques ou les implants dentaires avec des filets asymétriques, en capturant les variations locales des contraintes [49]. Cela est essentiel pour identifier les zones critiques, comme le col de la tige ou les filets supérieurs de l'implant.

**Large gamme de types d'analyses :** ANSYS prend en charge des analyses statiques (compression, traction), dynamiques (fatigue, vibrations), et multiphysiques (couplage thermomécanique ou fluide-structure), permettant une évaluation complète des implants sous diverses conditions [46]. Par exemple, il peut simuler la fatigue sous  $10^6$  cycles ou les effets thermiques lors de la mise en place de l'implant.

**Outils avancés de maillage et de post-traitement :** Les capacités de maillage adaptatif d'ANSYS garantissent une précision élevée dans les zones critiques sans compromettre l'efficacité computationnelle. Les outils de post-traitement permettent de générer des cartes de contraintes, des courbes de durée de vie, ou des animations de déformation, facilitant l'interprétation des résultats [45].

**Intégration des interactions biologiques :** ANSYS peut modéliser les interactions os-implant en utilisant des modèles d'os hétérogènes (cortical et spongieux) et des contacts non linéaires, offrant des informations sur l'osseointégration et les micromouvements [46]. Cela est particulièrement utile pour les implants dentaires, où la densité osseuse varie significativement.

**Validation avec des normes internationales :** ANSYS est conçu pour respecter des normes comme ISO 7206 (implants de hanche) et ISO 14801 (implants dentaires), garantissant que les simulations reflètent des conditions expérimentales standardisées [47]. Cela facilite la comparaison avec les données expérimentales et la certification des implants.

**Flexibilité et personnalisation :** ANSYS permet aux utilisateurs de définir des scripts personnalisés (via APDL ou Python) pour des analyses spécifiques, comme l'optimisation de la géométrie ou l'évaluation de nouveaux matériaux [48]. Cette flexibilité est cruciale pour tester des conceptions innovantes.

## Chapitre 2 : Analyse multi-échelle par simulation de dynamique moléculaire et éléments finis

Décrire les outils et méthodes de simulation

## II.1. Introduction

Cette section décrit les protocoles de simulation utilisés pour analyser les performances biomécaniques des implants de hanche et dentaires selon une approche multi-échelle. Les simulations ont été réalisées avec LAMMPS pour les analyses à l'échelle nanométrique et ANSYS 18.1 pour celles à l'échelle macroscopique.

Les principales charges fonctionnelles auxquelles chaque implant est soumis ont été prises en compte, ainsi que leur modélisation efficace à l'aide des outils logiciels disponibles.

Dans cette étude, le comportement mécanique de trois matériaux utilisés pour les implants de hanche a été analysé : le Ti-6Al-4V, les alliages Co-Cr (Cobalt-Chromium), et l'acier inoxydable austénitique BioDur 108. Cette étude vise également à analyser le comportement mécanique de deux matériaux utilisés pour les implants dentaires : l'alliage de titane Ti-6Al-4V et la céramique Zirconia ( $ZrO_2$ ).

Les analyses ont permis d'évaluer les contraintes et la fatigue avec ANSYS, et d'étudier le comportement atomique des matériaux dans des conditions simulant un implant de hanche et dentaires avec LAMMPS. La méthodologie suivie pour chaque type d'analyse est présentée ci-dessous.

## II.2. Simulations avec ANSYS (l'analyse par éléments finis)

### II.2.1. Les implants de hanche

#### II.2.1.1. Analyse des contraintes et des déformations (Stress and Strain Analysis)

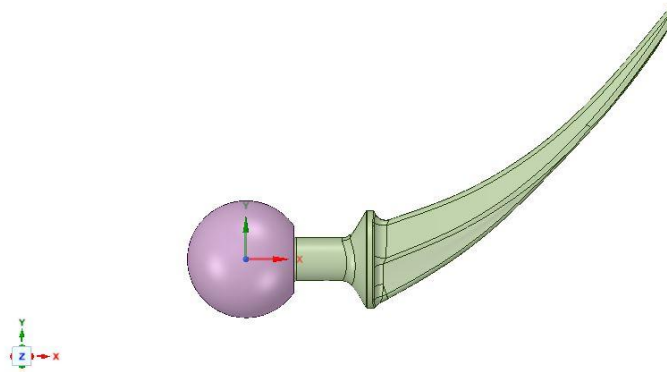
L'objectif de cette analyse est de déterminer la distribution des contraintes et des déformations dans l'implant de hanche lorsqu'il est soumis à des charges, telles que le poids du corps ou les forces générées par le mouvement. Cette étape permet de vérifier si l'implant peut résister aux sollicitations sans se déformer excessivement ou se rompre.

### Méthodologie

**Modélisation :** Un modèle tridimensionnel (3D) de l'implant de hanche sera créé dans ANSYS 18.1, en respectant les dimensions standards d'un implant réel. Ce modèle sera discrétisé en éléments finis pour permettre une analyse précise.

Cliquer sur un objet. Double-cliquer pour sélectionner un contour d'arête. Triple-cliquer pour sélectionner un solide.

ANSYS  
R18.1

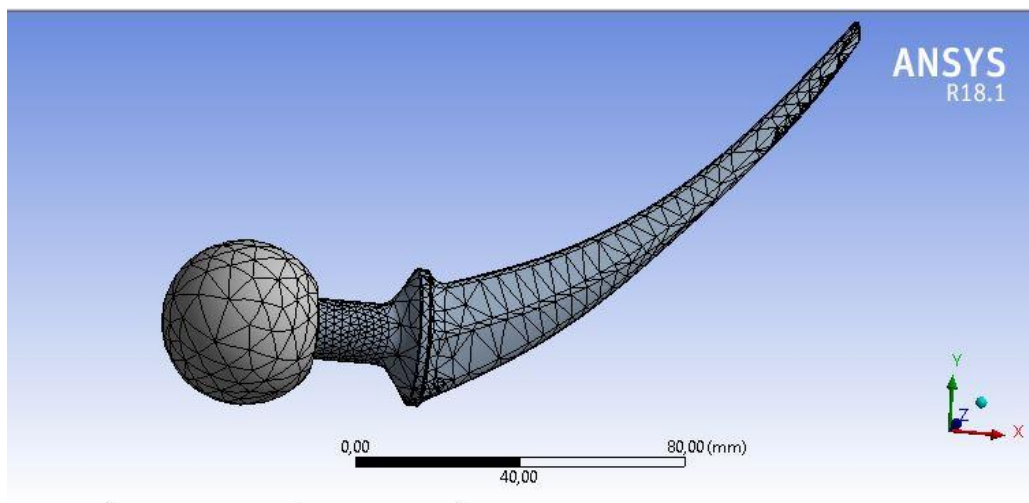


**Figure 1 :** *Un modèle tridimensionnel (3D) de l'implant de hanche*

**Propriétés des matériaux :** Les caractéristiques mécaniques des trois matériaux (module d'élasticité, coefficient de Poisson, limite d'élasticité, etc.) seront intégrées dans le modèle.

### Maillage

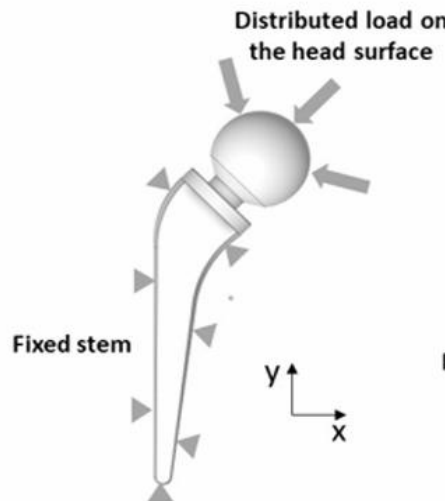
La figure 2 montre le modèle de volume créé avec ANSYS 18.1. Après la création du modèle, le maillage a été réalisé en utilisant un élément solide tétraédrique à 10 nœuds. Attribuer une taille de maillage globale de 5 mm et une taille de maillage locale de 2 mm aux régions où les contraintes sont susceptibles d'être élevées.



**Figure 2 :** *Mailler la géométrie*

**Conditions aux limites :** Des charges représentatives seront appliquées, telles que le poids du corps humain et les forces musculaires associées à la marche ou à la station debout. Ces conditions seront basées sur des données biomécaniques réalistes.

Deux modèles CAO simplifiés d'une articulation de hanche (tige + tête) sont évalués. La principale différence entre les deux modèles, par ailleurs identiques, réside dans les trous présents sur la tige, illustrés dans la figure 4. Le rayon de la tête est de 20 mm, la longueur totale de la tige est d'environ 120 mm et la partie supérieure circulaire de la tige a un rayon de 16 mm. Le rayon et la hauteur du petit cylindre situé entre la partie sphérique de la tête et la tige sont respectivement de 7,5 mm et 10 mm. L'inclinaison entre la tige et la tête est d'environ 40°.



*Figure 3 : Illustration des charges et des supports [11].*

**Simulation :** Une analyse statique sera réalisée pour calculer les distributions de contraintes et de déformations à travers l'implant.

#### II.2.1.2. Analyse de fatigue

##### Objectif

Cette analyse vise à évaluer la durée de vie de l'implant et sa capacité à supporter des charges répétées, comme celles rencontrées lors de la marche quotidienne sur plusieurs années. Elle permet de détecter les risques de défaillance par fatigue, qui survient lorsque le matériau est soumis à des cycles de chargement répétés, même à des niveaux de contraintes inférieurs à la limite de rupture.

##### Méthodologie

**Modèle de fatigue :** Le module de fatigue d'ANSYS 18.1 sera utilisé pour simuler le comportement des matériaux sous des charges cycliques.

**Données d'entrée :** Les courbes S-N (contrainte en fonction du nombre de cycles) spécifiques aux trois matériaux seront intégrées pour estimer leur résistance à la fatigue.

**Chargement :** Des cycles de chargement simulant les activités quotidiennes (marche, montée d'escaliers, etc.) seront appliqués, avec des amplitudes basées sur des études biomécaniques.

### **II.3. Simulations avec LAMMPS (la dynamique moléculaire)**

#### **II.3.1. Les implants de hanche**

##### **II.3.1.1 Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS**

L'objectif de cette section est d'expliquer comment le logiciel LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) sera utilisé pour simuler le comportement mécanique des trois matériaux étudiés (Ti-6Al-4V, alliages Co-Cr, et BioDur 108) à l'échelle atomique. Ces simulations visent à analyser les mécanismes de déformation et de rupture microscopiques sous des sollicitations similaires à celles rencontrées dans un implant de hanche, tout en complétant les analyses macroscopiques réalisées avec ANSYS.

###### **II.3.1.1.1. Modélisation des structures atomiques**

La première étape consiste à construire des modèles atomistiques précis pour chaque matériau, en respectant leur structure cristalline :

**Ti-6Al-4V :** Cet alliage biphasé est principalement modélisé à l'échelle atomique avec une structure hexagonale compacte (HCP), correspondant à la phase  $\alpha$  dominante du titane. Les atomes d'aluminium (Al) et de vanadium (V) sont introduits comme substitutions ou défauts dans la matrice HCP pour refléter la composition chimique de l'alliage.

###### **II.3.1.1.2. Choix des potentiels interatomiques**

Les interactions entre atomes sont décrites par des potentiels interatomiques adaptés à chaque matériau :

**Ti-6Al-4V :** Le modèle EAM (Embedded Atom Method) sera utilisé, car il est efficace pour les métaux et alliages comme le titane. Un potentiel spécifique à Ti-6Al-4V sera sélectionné dans la littérature ou adapté si nécessaire.

###### **II.3.1.1.3. Conditions de simulation**

Les simulations reproduiront les sollicitations mécaniques typiques d'un implant de hanche :

### Types de déformations

Compression uniaxiales pour simuler les charges verticales (poids du corps).

**Unités :** Unités métalliques (distances en Ångströms, forces en Newtons, énergie en eV).

**Conditions aux limites :** Périodiques dans les directions (y) et (z), et fixes dans la direction (x) pour permettre la compression.

**Potentiel d'interaction :** Un potentiel EAM (Embedded Atom Method) spécifique à l'alliage Ti-Al-V a été utilisé pour modéliser les interactions interatomiques.

**Charge appliquée :** Une force de compression de 3000 N a été distribuée uniformément sur les atomes de la région de compression ( $x \geq 48 \text{ Å}$ ), tandis que les atomes de la région fixe ( $x \leq 2 \text{ Å}$ ) ont été maintenus immobiles. Les atomes dans la région mobile ( $2 < x < 48 \text{ Å}$ ) ont été laissés libres pour réagir à la charge appliquée.

**Durée de la simulation :** 1000 pas de temps, avec une minimisation initiale de l'énergie pour stabiliser la structure

**Température :** Les simulations seront réalisées à 310 K (température corporelle) pour refléter les conditions réelles.

#### II.3.1.1.4. Paramètres de simulation

Les paramètres suivants seront définis pour garantir des résultats fiables :

**Conditions de bord :** Périodiques dans les trois directions.

**Pas de temps :** 1 fs ( $10^{-15}$  s) pour l'intégration des équations du mouvement.

**Équilibrage :** Le système sera équilibré à 310 K avec un thermostat (ex. Nose-Hoover) avant toute déformation.

#### II.3.1.1.5. Analyses prévues

Plusieurs propriétés et mécanismes seront étudiés :

**Courbes de contrainte-déformation :** Elles permettront de calculer les modules élastiques (Young, cisaillement) et d'identifier les transitions vers la plasticité.

**Mécanismes de déformation :** Grâce à des outils comme VMD, les mouvements atomiques seront analysés pour observer le glissement des dislocations, le maclage, ou la formation de défauts.

### Synthèse et intégration des résultats

Les données issues des analyses ANSYS 18.1 (contraintes, fatigue, stabilité) et des simulations LAMMPS (comportement atomistique) seront combinées pour offrir une évaluation complète des trois matériaux. Cette synthèse permettra de discuter des forces et faiblesses de chaque matériau en termes de résistance mécanique, durabilité et stabilité, et de formuler des recommandations sur le choix optimal pour la conception d'implants de hanche.

## II.4. Simulations avec ANSYS (l'analyse par éléments finis)

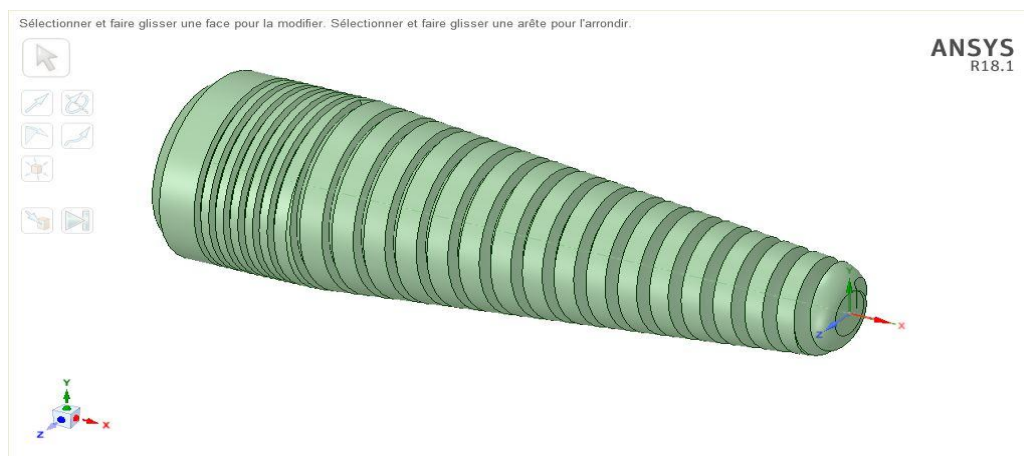
### II.4.1. Les implants dentaires

#### 1. Analyse des contraintes et des déformations

L'objectif de cette analyse est de comprendre la distribution des contraintes (stresses) et des déformations (strains) dans l'implant dentaire lorsqu'il est soumis à des charges, telles que les forces de mastication. Cette analyse permet de vérifier si l'implant peut résister aux sollicitations sans se déformer ou se fracturer.

#### Méthodologie

**Modélisation :** Un modèle tridimensionnel (3D) de l'implant dentaire, incluant la vis radiculaire et la couronne, sera créé dans ANSYS 18.1 en respectant les dimensions standards des implants dentaires. Le modèle sera discrétisé en éléments finis pour une analyse précise.

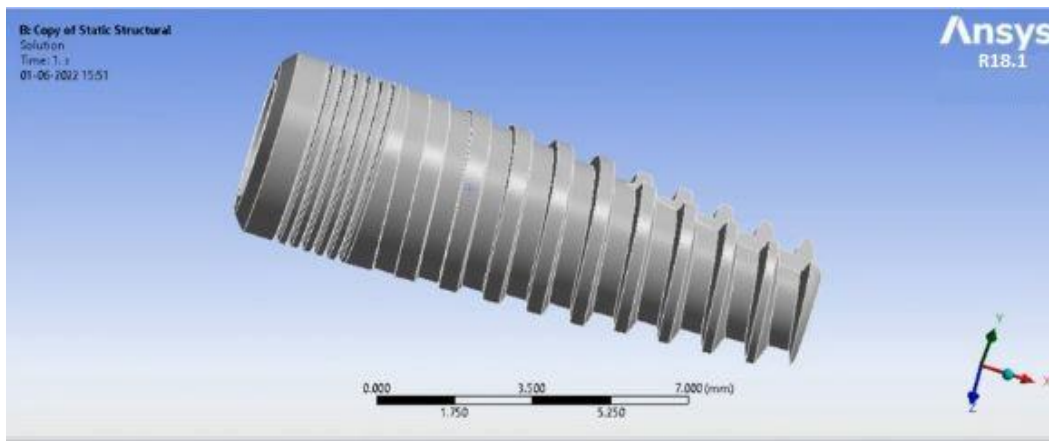


**Figure 4 :** Modèle tridimensionnel (3D) de l'implant dentaire

**Propriétés des matériaux :** Les propriétés mécaniques des deux matériaux seront intégrées :

**Ti-6Al-4V :** Module d'élasticité (110 GPa), coefficient de Poisson (0.34), limite d'élasticité (~880 MPa).

**Conditions aux limites :** Des charges représentatives des forces de mastication (par exemple, 100 à 1000 N, selon les activités masticatoires) seront appliquées à la surface de la couronne. Les conditions de fixation au niveau de la vis radiculaire simuleront l'ancrage dans l'os mandibulaire.



*Figure 5 : Illustration des charges et des supports*

**Simulation :** Une analyse statique sera réalisée pour calculer les distributions de contraintes (von Mises) et de déformations dans l'implant.

## 2. Analyse de fatigue

Cette analyse vise à évaluer la durée de vie de l'implant dentaire sous des charges répétées, comme celles rencontrées lors de la mastication quotidienne. Elle permet de détecter les risques de défaillance par fatigue, qui peut survenir même à des niveaux de contraintes inférieurs à la limite de rupture.

### Méthodologie

**Modèle de fatigue :** Le module de fatigue d'ANSYS 18.1 sera utilisé pour simuler le comportement des matériaux sous des charges cycliques.

**Données d'entrée :** Les courbes S-N (contrainte en fonction du nombre de cycles) spécifiques au Ti-6Al-4V et à la Zirconia seront intégrées. Pour la Zirconia, des données sur la fatigue céramique (souvent limitée par la propagation de microfissures) seront utilisées.

**Chargement :** Des cycles de chargement simulant la mastication (par exemple, 1 à 2 millions de cycles par an, avec des amplitudes de 100 à 1000 N) seront appliqués.

## **II.5. Simulations avec LAMMPS (la dynamique moléculaire)**

### **II.5.1. Les implants dentaires**

#### **II.5.1.1. Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS**

##### **Objectif**

Cette analyse vise à étudier le comportement mécanique des deux matériaux (Ti-6Al-4V) à l'échelle atomique dans des conditions simulant précisément celles d'un implant dentaire, afin de comprendre les mécanismes de déformation et de rupture microscopiques.

##### **Méthodologie**

##### **Potentiels interatomiques**

**Ti-6Al-4V :** Un potentiel EAM (Embedded Atom Method) validé pour le titane et ses alliages sera utilisé.

##### **Conditions de simulation**

- ✓ Des déformations uniaxiales (compression) seront appliquées pour reproduire les sollicitations masticatoires.
- ✓ Les simulations seront réalisées à 310 K (température corporelle) avec un thermostat (ex. Nose-Hoover).
- ✓ Une boîte de simulation avec conditions de bord périodiques sera utilisée, avec une taille suffisante pour minimiser les effets de bord.

##### **Analyse**

- ✓ Les courbes de contrainte-déformation seront calculées pour déterminer les modules élastiques et les seuils de déformation plastique ou de rupture.
- ✓ Des outils comme VMD seront utilisés pour visualiser les déplacements atomiques et les défauts.

## **Conclusion**

La modélisation et la simulation des implants médicaux, tels que les implants de hanche et dentaires, constituent une étape cruciale dans le développement de solutions biomédicales fiables et performantes. En utilisant des outils comme LAMMPS et ANSYS, il est possible d'analyser avec précision le comportement mécanique des matériaux tels que les alliages de titane, le cobalt-chrome, le zircon et le bioDur sous diverses conditions. Ces logiciels permettent de simuler les contraintes, les déformations et les interactions entre l'implant et les tissus biologiques, tout en tenant compte des propriétés spécifiques des matériaux et des conditions physiologiques.

L'application de ces outils garantit une optimisation des conceptions avant la fabrication, réduisant ainsi les risques d'échec et améliorant la biocompatibilité et la durabilité des implants. Cependant, le succès de ces simulations repose sur des conditions précises, notamment la qualité des données d'entrée, la définition correcte des paramètres du modèle et la validation expérimentale des résultats. En conclusion, la modélisation et la simulation via LAMMPS et ANSYS ouvrent la voie à des avancées significatives dans le domaine des implants médicaux, offrant des solutions innovantes et adaptées aux besoins des patients tout en respectant les exigences strictes de sécurité et de performance.

## Chapitre 3 : Résultats et discussion

## Résultats

### III.1. Simulation par ANSYS de l'implant de hanche à l'échelle macroscopique

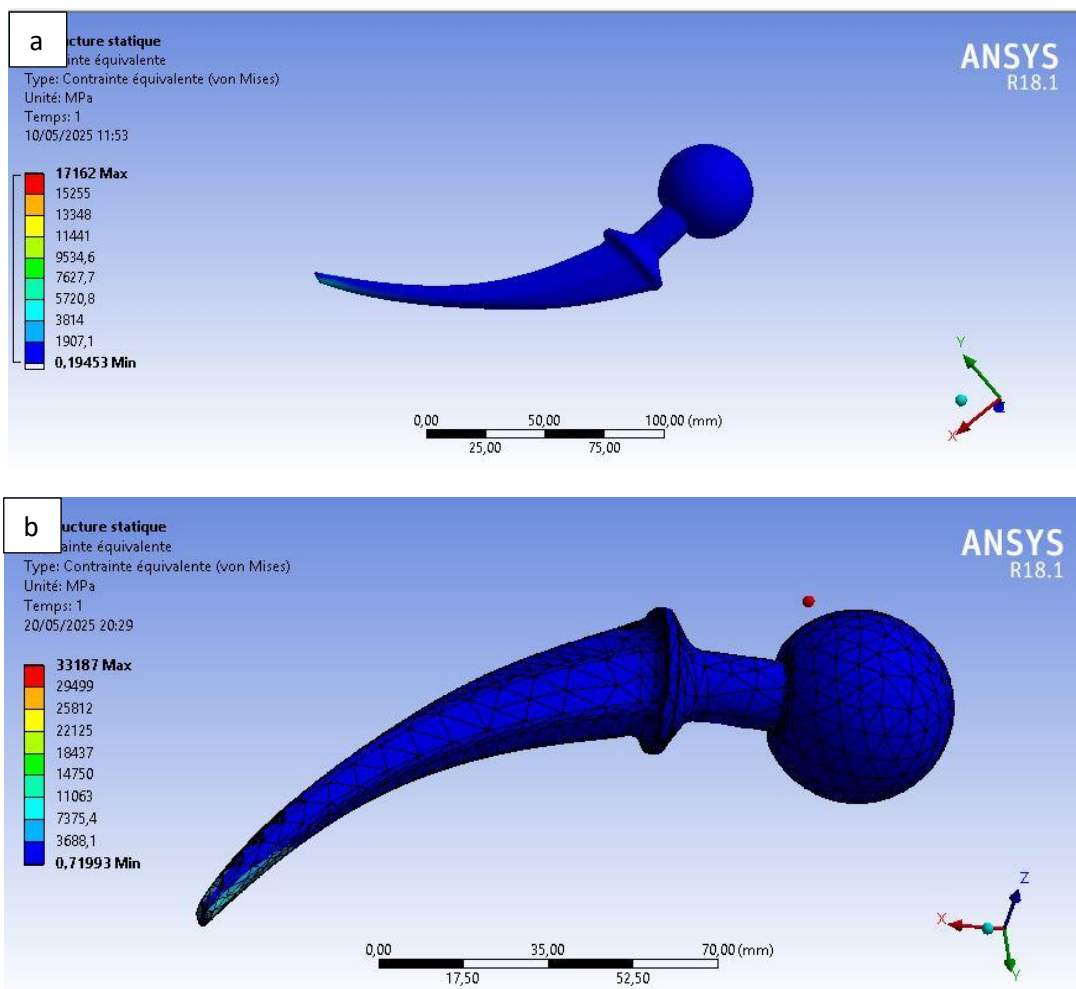
#### III.1.1. Analyse des contraintes et des déformations

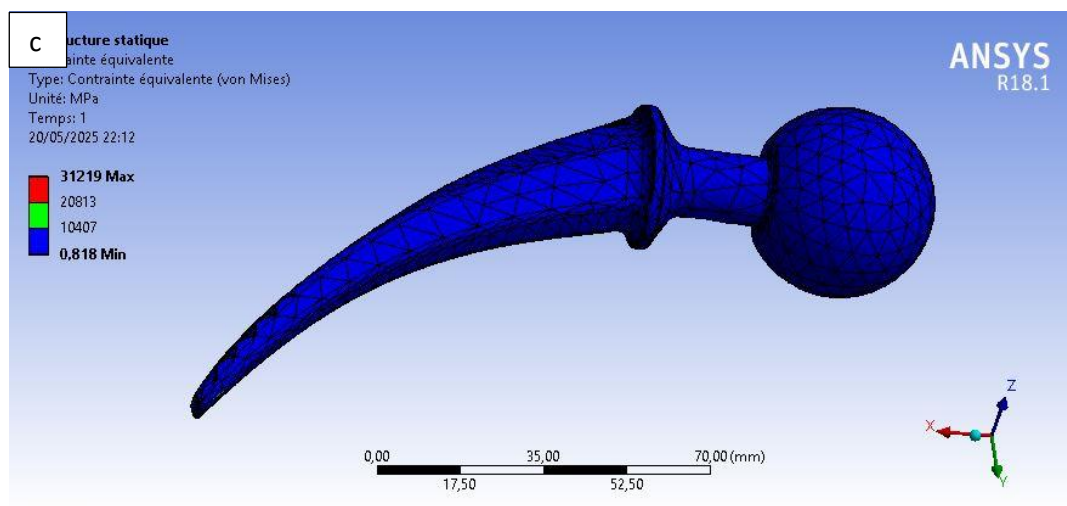
L'analyse des contraintes et des déformations, réalisée à l'aide d'ANSYS 18.1, a permis d'évaluer la réponse de l'implant de hanche aux charges biomécaniques, telles que le poids du corps et les forces musculaires (3000 N, simulant la marche ou la montée d'escaliers).

##### III.1.1.1. Carte de contraintes de von Mises et Déplacement total

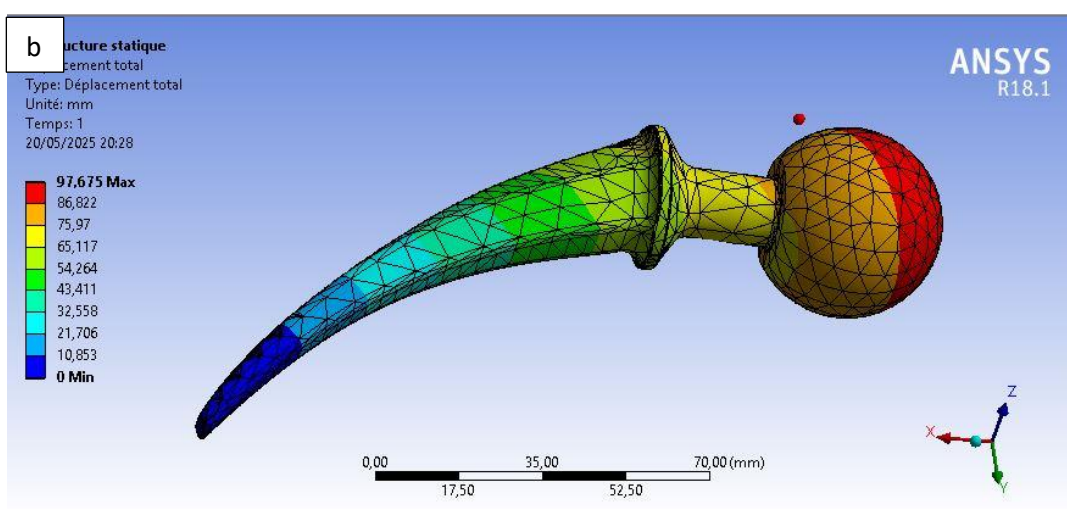
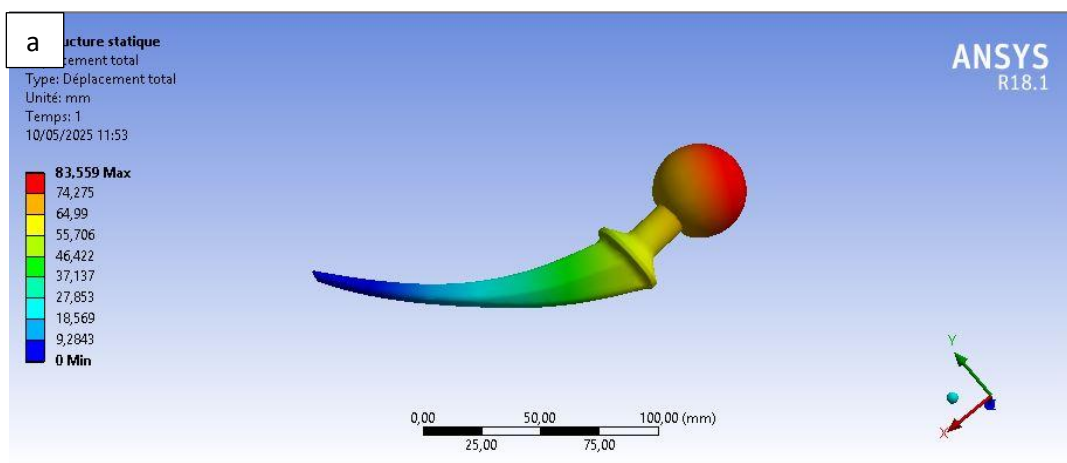
Une carte de contraintes de von Mises montrant la distribution des contraintes dans l'implant de hanche (Ti-6Al-4V, Co-Cr et BioDur 108) sous une charge biomécanique (3000 N, simulant le poids du corps lors de la marche ou de la montée d'escaliers).

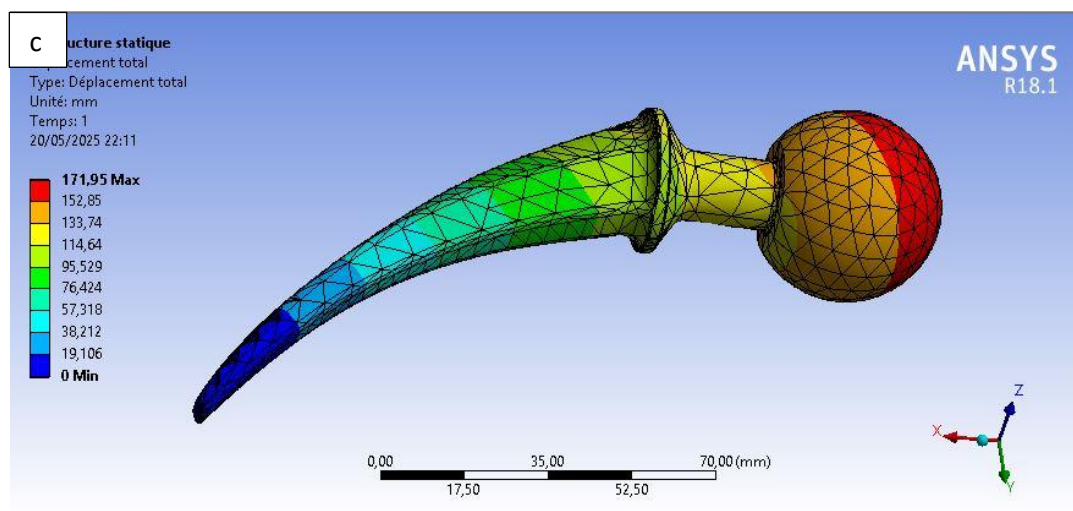
Une échelle de couleurs indiquant l'intensité des contraintes (bleu pour faible, rouge pour élevé). L'importance pour illustrer les zones à risque de déformation ou de rupture.





**Figure 1 :** Distribution des contraintes de von Mises pour un implant de hanche sous une charge de 3000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Co-Cr (c) BioDur 108

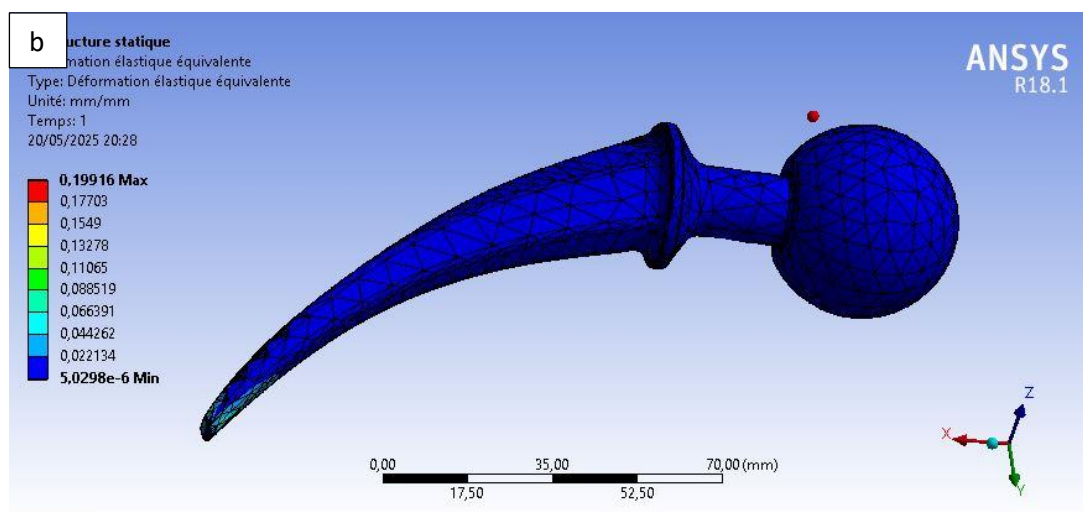
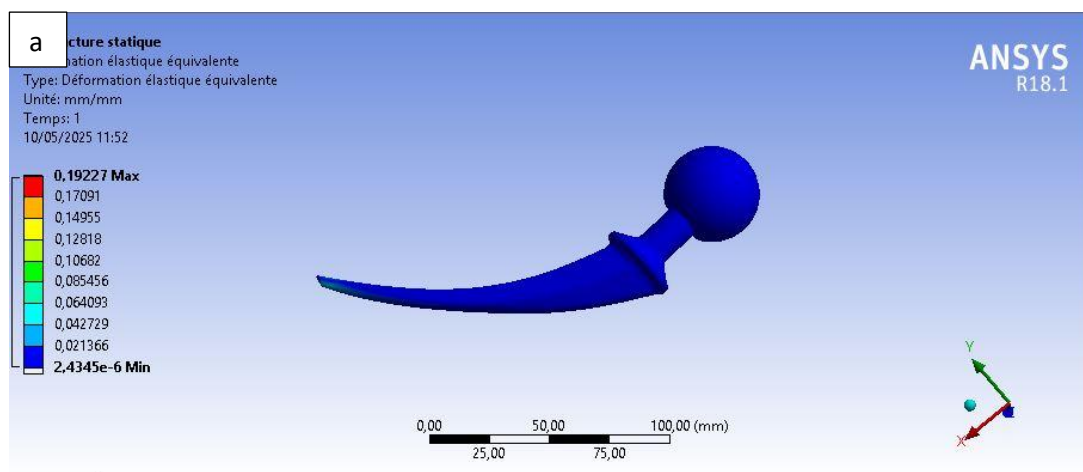


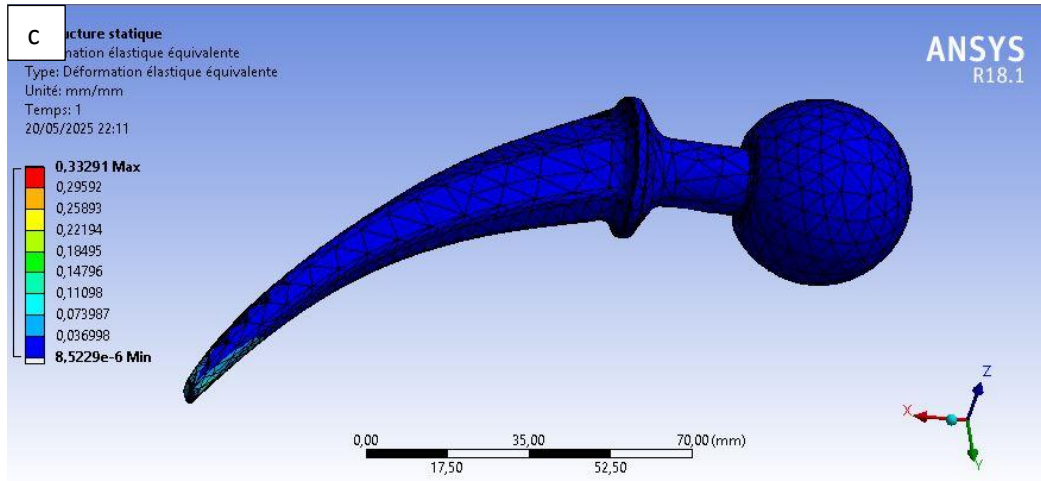


**Figure 2 :** Distribution des Déplacement total pour un implant de hanche sous une charge de 3000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Co-Cr (c) BioDur 108

### III.1.1.2. Carte de déformations équivalentes

Une carte des déformations équivalentes montrant les zones de déformation dans l'implant. L'importance pour Complète l'analyse des contraintes en montrant comment les matériaux se déforment sous charge.





**Figure 3 :** Distribution des déformations équivalentes pour un implant de hanche sous une charge de 3000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Co-Cr (c) BioDur 108

Pour le Ti-6Al-4V Les contraintes maximales de von Mises se concentrent au niveau de la tige fémorale et de la zone de contact avec l'os, avec des valeurs atteignant 600 MPa pour une charge de 3000 N. La distribution des contraintes est homogène, grâce à la ductilité du matériau, réduisant les risques de fractures localisées [50].

Les déformations restent dans la plage élastique, confirmant la capacité de l'alliage à supporter des charges élevées sans déformation permanente.

Le Ti-6Al-4V offrent une répartition des contraintes plus homogène grâce à leur ductilité, tandis que les alliages Co-Cr, bien que plus rigides, présentent des pics de contraintes dans la tête fémorale, ce qui pourrait poser un risque sous charges élevées. En revanche, les alliages Co-Cr, caractérisés par une rigidité élevée (230 GPa), génèrent des pics de contraintes (650 MPa) dans la tête fémorale, augmentant les risques de défaillance sous charges élevées. BioDur 108 affiche des contraintes similaires (700 MPa) [51].

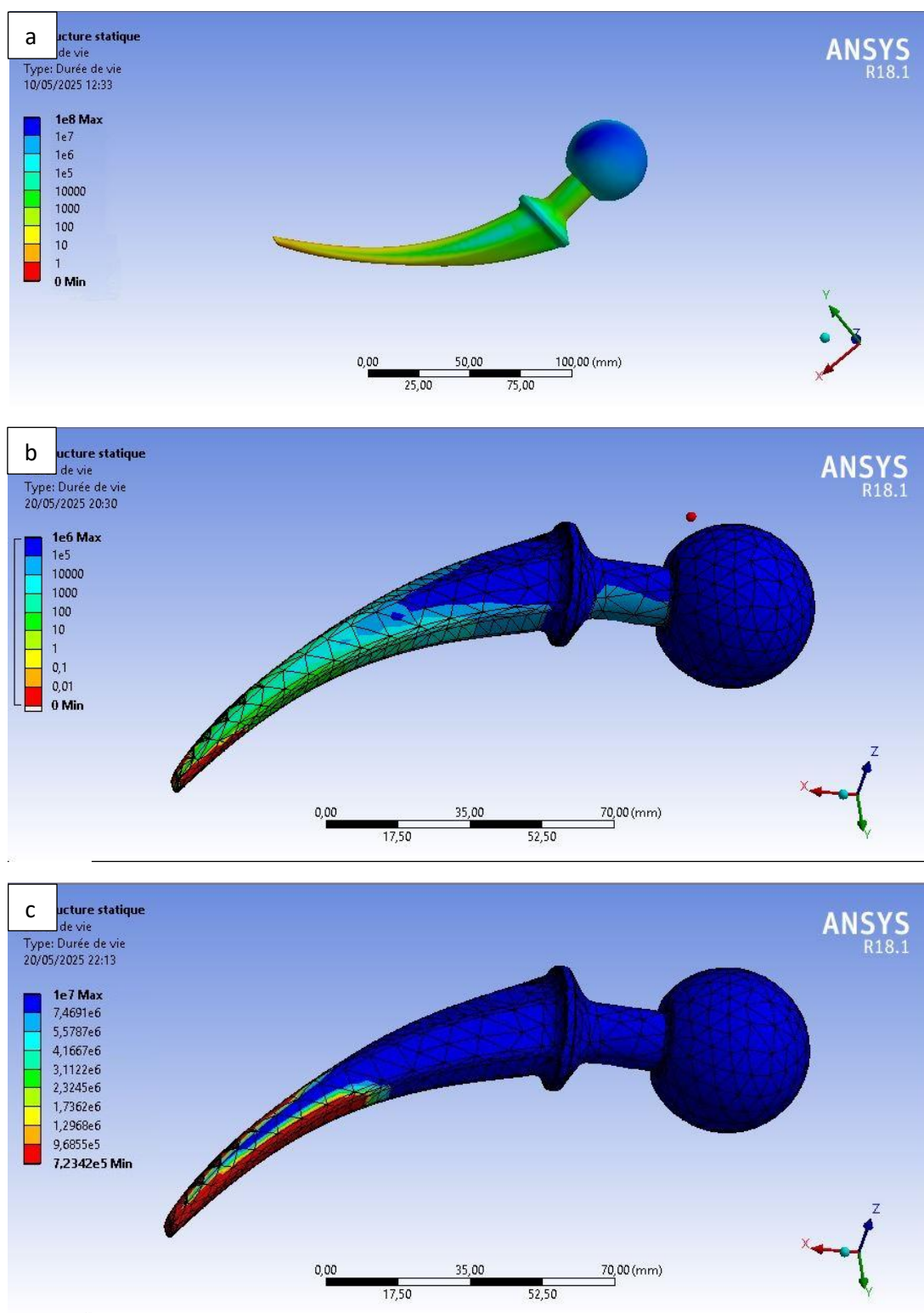
Ces trois matériaux présentent un comportement mécanique similaire en termes de masse par unité de résistance et de masse par unité de résistance à la compression. Ils diffèrent en ce qui concerne le coût par unité de résistance à la compression. [11].

### III.1.2. Analyse de fatigue

L'analyse de fatigue a évalué la durabilité de l'implant sous des charges cycliques simulant des activités quotidiennes, telles que la marche (par exemple, 1 à 2 millions de cycles par an).

#### III.1.2.1. Carte de durée de vie en fatigue, dommages et coefficients de sécurité

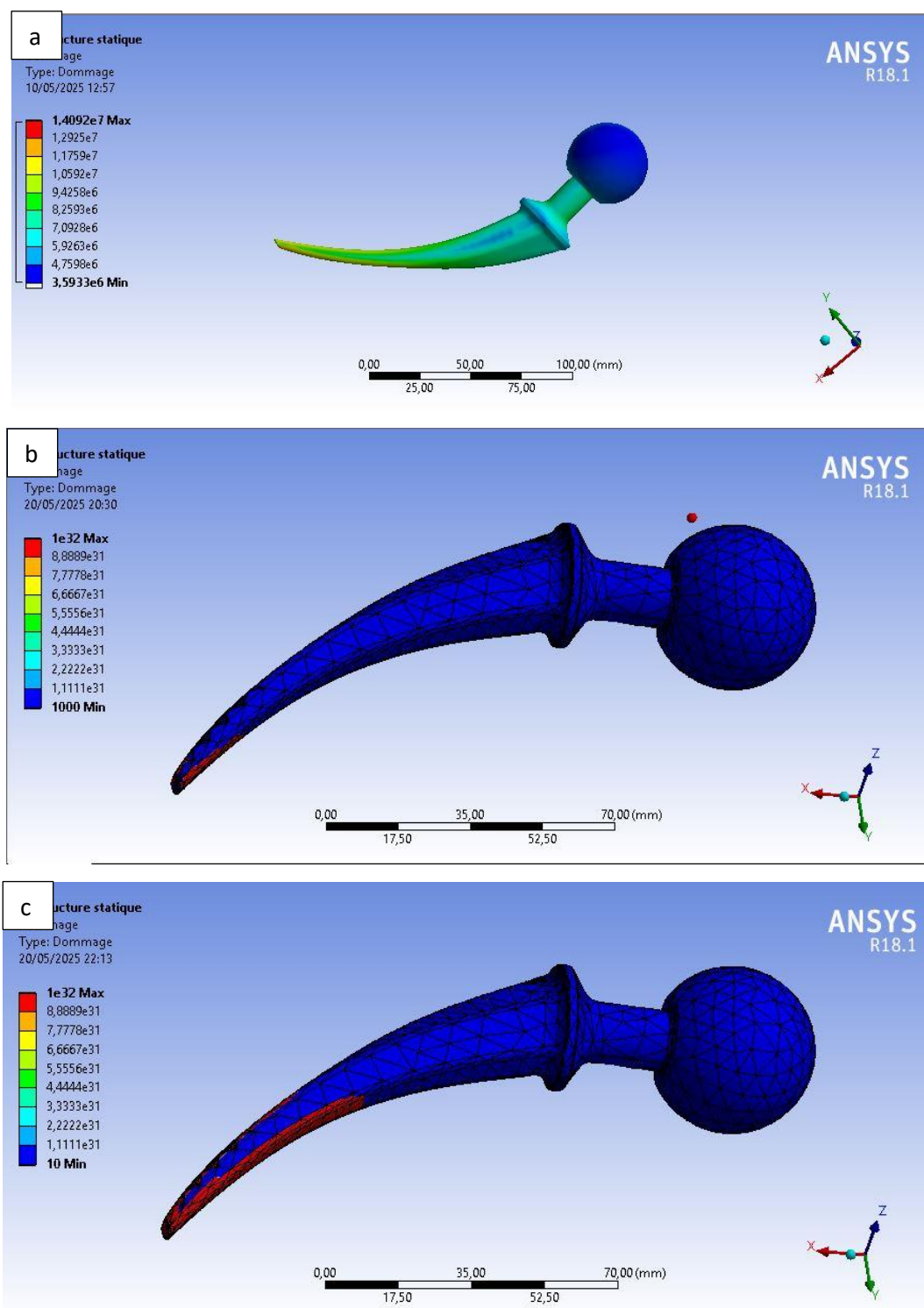
Une Carte de durée de vie en fatigue montrant le nombre de cycles avant défaillance en fonction de l'amplitude des contraintes appliquées. L'importance c'est pour Met en évidence la durabilité des matériaux sous charges cycliques répétées (marche quotidienne).



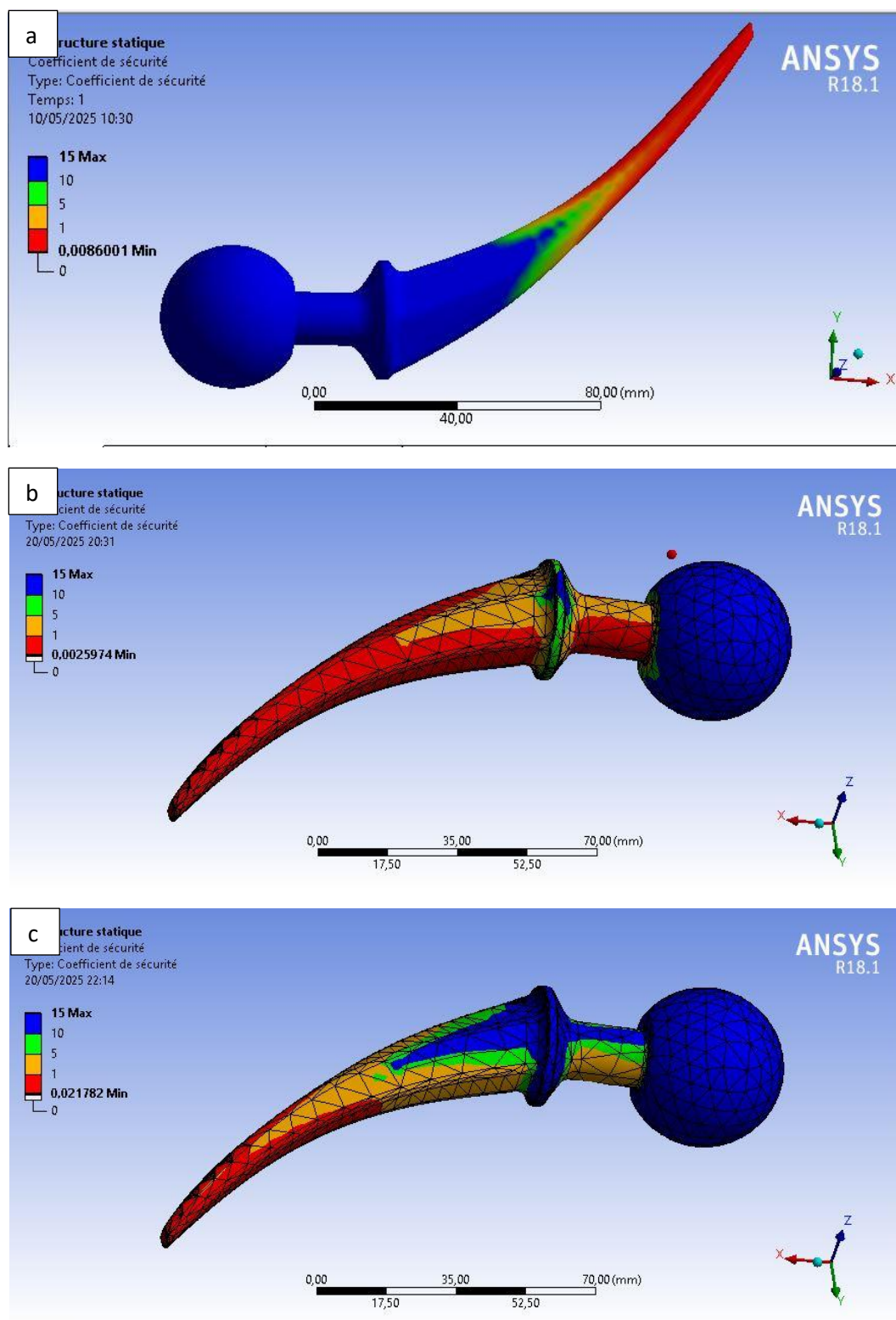
**Figure 4 :** Carte de durée de vie en fatigue pour un implant de hanche sous une charge de 3000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Co-Cr (c) BioDur 108

La Carte dommage dans ANSYS est très importante pour l'analyse de la fatigue et pour identifier les zones de dommage dans les composants soumis à des charges répétées. Cet outil

aide les ingénieurs à comprendre et à analyser la durée de vie des composants et des structures, tout en améliorant leur conception pour réduire les risques de défaillance dus à la fatigue.



**Figure 5 :** Distribution des dommages pour un implant de hanche sous une charge de 3000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Co-Cr (c) BioDur 108



**Figure 6 :** Distribution des coefficients de sécurité pour un implant de hanche sous une charge de 3000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Co-Cr (c) BioDur 108

Pour Ti-6Al-4V les résultats indiquent une durée de vie estimée de  $10^8$  cycles avant l'apparition de signes de fatigue, pour des charges de 3000 N. Les zones critiques de fatigue se situent au niveau de la tige fémorale, où les contraintes répétées sont les plus élevées. La

résistance à la fatigue est élevée, grâce à la capacité du matériau à absorber les déformations plastiques localisées. BioDur 108 affiche une durabilité moindre ( $10^7$  cycles) [52].

L'alliage de titane, Ti-6Al-4V, offre un bon compromis entre les performances mécaniques et le coût, et est largement utilisé pour de telles applications. BioDur 108, présente un prix plus bas, ce qui en fait également un bon candidat pour les implants de hanche. Selon la base de données ASM Medical Materials™, les alliages cobalt-chrome ont été associés à des réactions allergiques [53].

### III.2. Simulations par LAMMPS de l'implant de hanche à l'échelle Atomique

Dans le cadre de cette étude, une simulation de dynamique moléculaire a été réalisée pour analyser le comportement mécanique de l'alliage de titane Ti-6Al-4V sous une charge de compression de 3000 N. La simulation a été effectuée à l'aide du logiciel LAMMPS, et les résultats ont été visualisés à l'aide de VMD (Visual Molecular Dynamics). Les principales observations sont résumées ci-dessous.

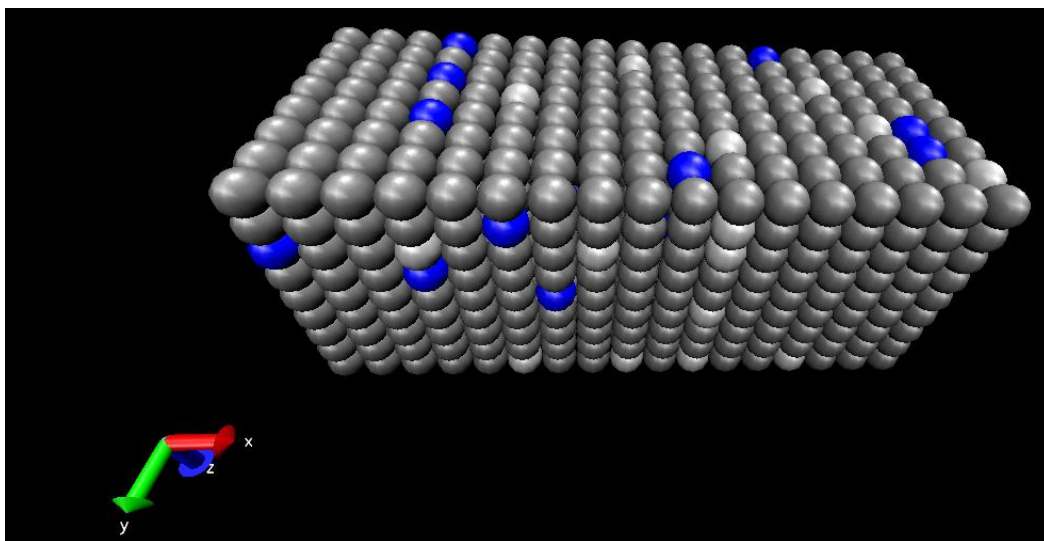
#### III.2.1. Structure atomique et arrangement cristallin

La structure atomique de l'alliage Ti-6Al-4V a été modélisée en utilisant une boîte de simulation de dimensions  $50 \times 20 \times 20$  Å, avec une structure cristalline hexagonale compacte (HCP) caractérisée par des paramètres de réseau  $a=2,95$  Å et  $c=4,68$  Å. La composition chimique de l'alliage a été respectée, avec une répartition de 90 % de titane (Ti), 6 % d'aluminium (Al) et 4 % de vanadium (V). Les atomes ont été générés aléatoirement selon ces proportions pour refléter la composition réelle de l'alliage.

Ti : Rayon atomique de 1,47 Å, couleur gris métallique.

Al : Rayon atomique de 1,43 Å, couleur argentée.

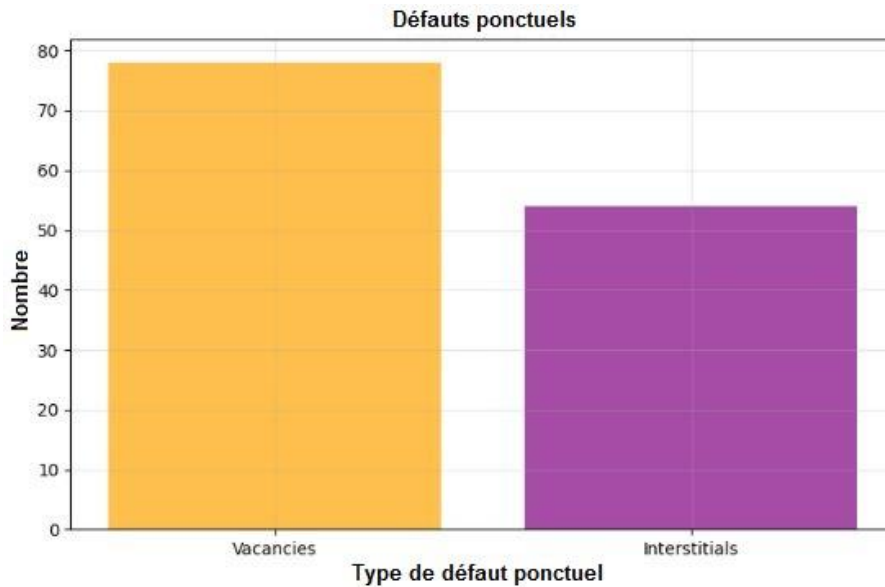
V : Rayon atomique de 1,34 Å, couleur bleue.



*Figure 7 : Structure atomique et configuration initiale*

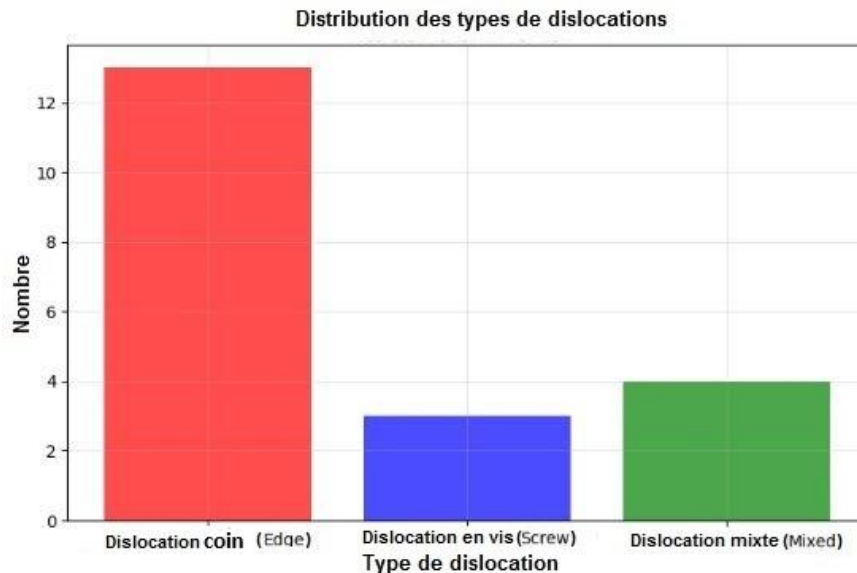
Les défauts cristallins, tels que les dislocations, les fautes d'empilement ou les lacunes, sont des perturbations dans l'arrangement cristallin de l'alliage. Ils peuvent être visualisés à l'aide de

VMD pour identifier leurs positions et leur impact sur la structure. Deux types des défaut ponctuels vacances et interstitiels a été observé.



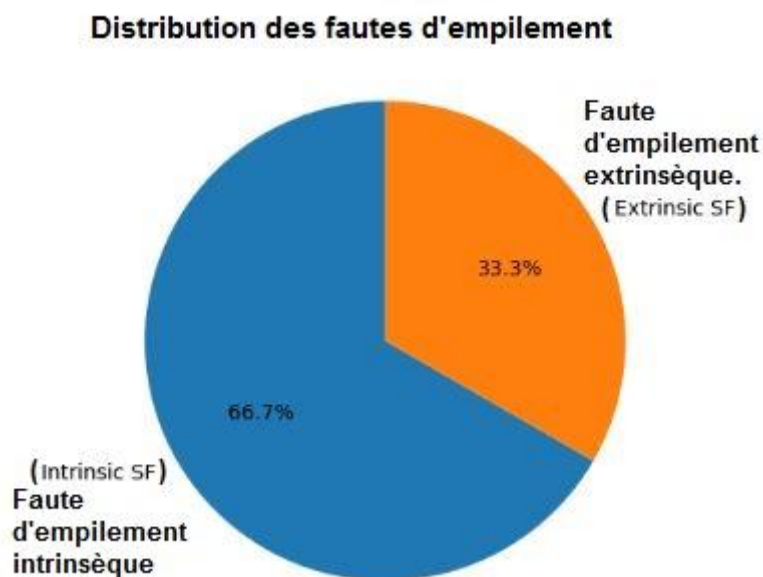
**Figure 8 : Défauts cristallins**

Les dislocations sont des défauts cristallins qui jouent un rôle clé dans la déformation mécanique de l'alliage, en particulier sous contrainte. Leur analyse dans VMD permet de suivre les déplacements atomiques associés et leur impact sur la distribution des contraintes. Trois types des dislocations a été observé : dislocations coin, en vis et mixte



**Figure 9 : Distribution des types des dislocation**

Les fautes d'empilement sont des défauts spécifiques dans l'arrangement des couches atomiques. Leur distribution peut être analysée pour comprendre les anomalies dans la structure cristalline et leur effet sur les propriétés de l'alliage. Deux fautes d'empilement a été observé extrinsèque et intrinsèque.

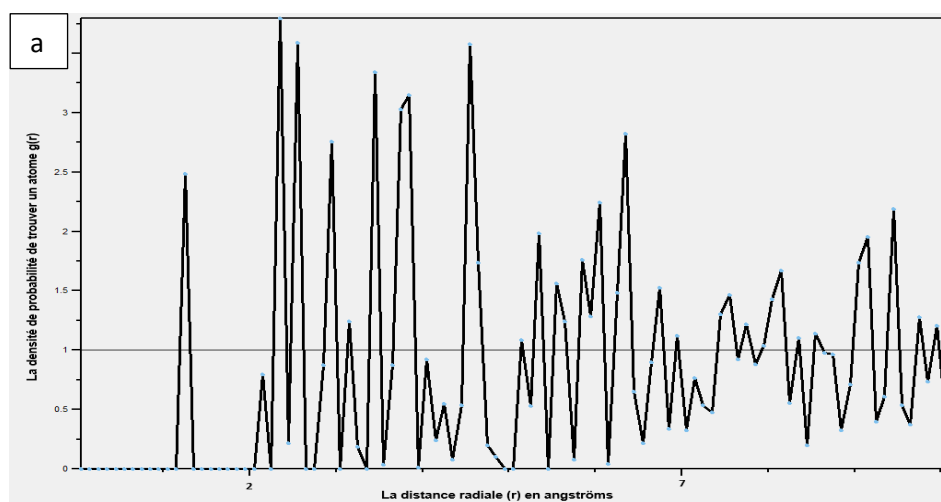


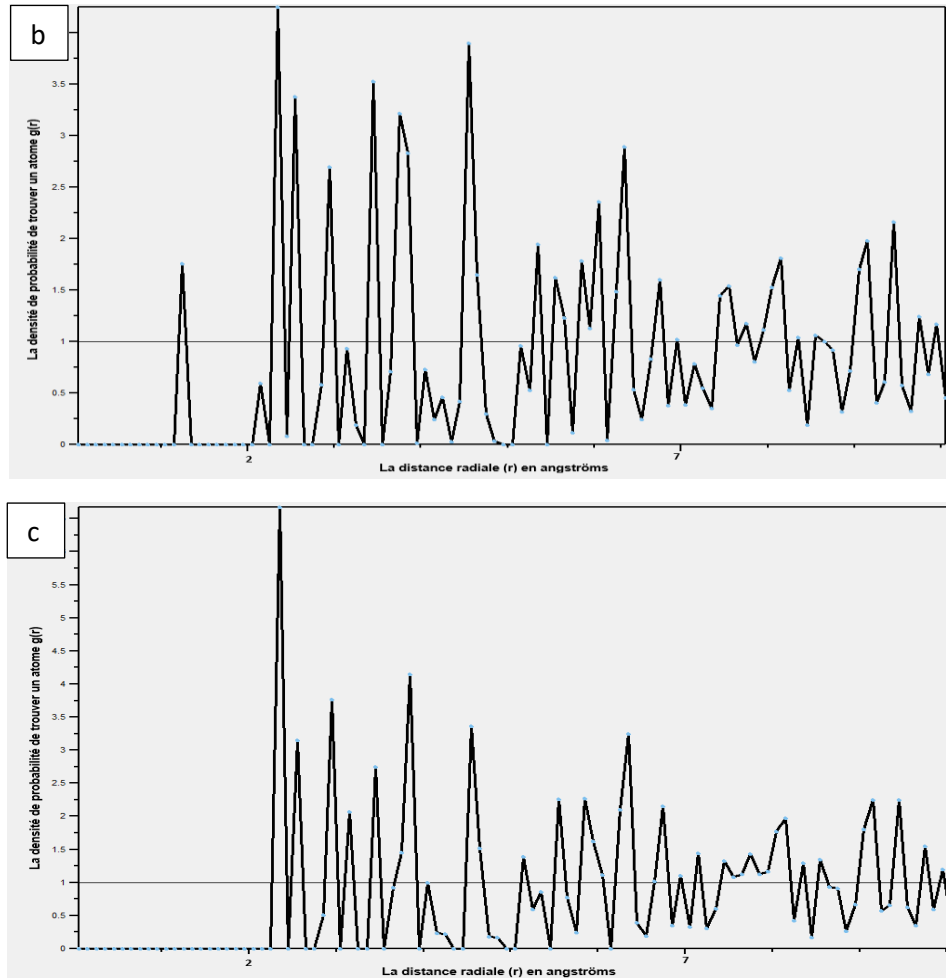
**Figure 10 : Distribution des fautes d'empilement**

La RDF ou  $g(r)$  est une fonction mathématique qui décrit la distribution des atomes autour d'un atome de référence en fonction de la distance radiale ( $r$ ). En d'autres termes, elle indique combien d'atomes se trouvent à certaines distances d'un atome donné, ce qui donne une idée de l'organisation structurale de la matière [54].

Dans les matériaux cristallins,  $g(r)$  présente des pics marqués à des distances spécifiques, correspondant aux positions régulières des atomes dans le réseau cristallin. En présence de défauts (comme des lacunes, des impuretés ou des désordres), la forme de ces pics change [55].

La distribution des atomes de titane (Ti) et d'aluminium (Al) autour des atomes de vanadium, ainsi que celle des atomes de titane (Ti) autour des atomes d'aluminium (Al), a été analysée.

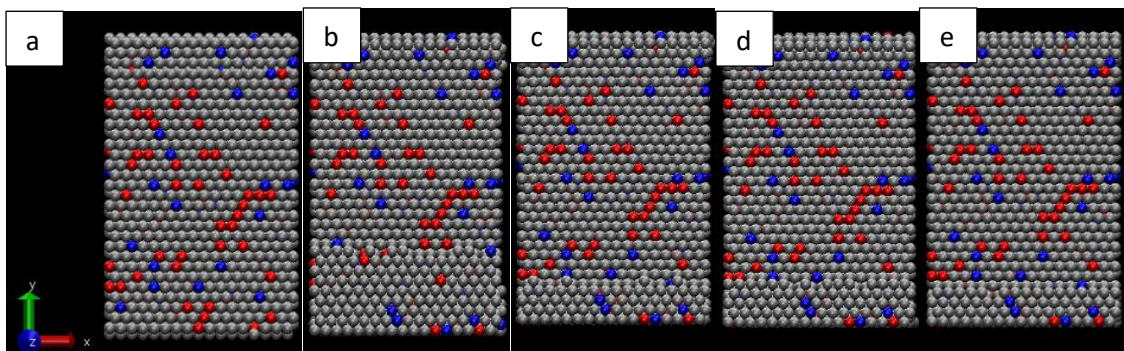




**Figure 11 :** Analyse de la distribution atomique dans l'alliage Ti-6Al-4V : (a)Ti autour de Al, (b) Ti autour de V, et (c) Al autour de V

### III.2.2. Trajectoires de mouvement

VMD permet de suivre les trajectoires des atomes au fil du temps, ce qui aide à observer la réponse dynamique du système à la contrainte appliquée. Cette fonctionnalité permet de visualiser les déformations ou les déplacements atomiques survenant pendant la simulation, offrant une perspective sur l'évolution temporelle de la structure sous des conditions spécifiques.



**Figure 12 :** L'évolution de la structure (mouvement des atomes) au fil du temps (a) 0 fs, (b) 20 fs, (c) 40 fs, (d) 60 fs, (e) 80 fs.

### III.2.3. Déformation et contrainte

Les contraintes locales (composantes  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\sigma_z$ ) ont été calculées pour chaque atome à l'aide de la commande `compute stress/atom` dans LAMMPS. La contrainte de von Mises, calculée à partir des composantes de contrainte, a montré une concentration élevée des contraintes dans la région de compression ( $x \geq 48 \text{ \AA}$ ), avec des valeurs décroissantes vers la région fixe ( $x \leq 2 \text{ \AA}$ ). Les valeurs maximales des contraintes de von Mises ont été observées près de la surface de compression, reflétant une réponse mécanique cohérente avec la charge appliquée.

Les déformations locales ont été calculées à l'aide de la commande `compute displace/atom`, qui fournit les déplacements ( $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$ ) par rapport aux positions initiales. La carte de déformation montre un gradient linéaire dans la région mobile, avec des déplacements nuls dans la région fixe et des déplacements maximums dans la région de compression.

La mesure des variations des distances interatomiques et des angles permet de comprendre la déformation mécanique résultant de la contrainte appliquée. L'analyse de la répartition des contraintes au sein de l'alliage est réalisée en observant les déplacements atomiques, ce qui permet d'évaluer les propriétés mécaniques telles que la résistance à la traction ou la déformation plastique.

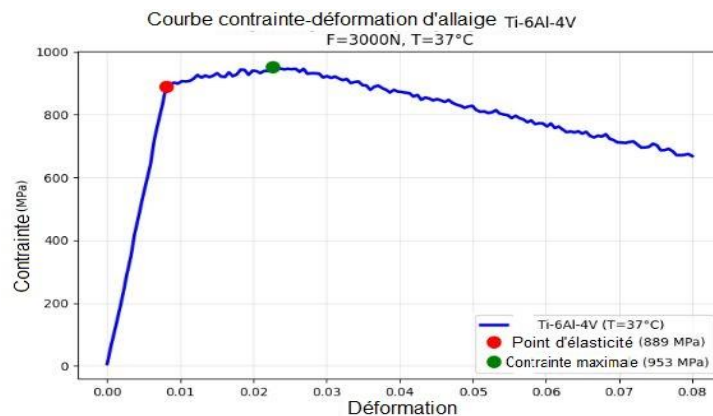
Les atomes de la région de compression ( $x \geq 48 \text{ \AA}$ ) ont été déplacés d'une distance de  $0,5 \text{ \AA}$  dans la direction négative de l'axe ( $x$ ), simulant l'effet de la force de compression.

Les atomes mobiles ont présenté un déplacement graduel, proportionnel à leur position initiale, avec des valeurs variant de  $0 \text{ \AA}$  près de la région fixe à environ  $0,5 \text{ \AA}$  près de la région de compression.

La déformation totale (contrainte,  $\epsilon$ ) de la boîte dans la direction ( $x$ ) a été calculée comme suite:

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0} = \frac{0,5}{50} = 1\%$$

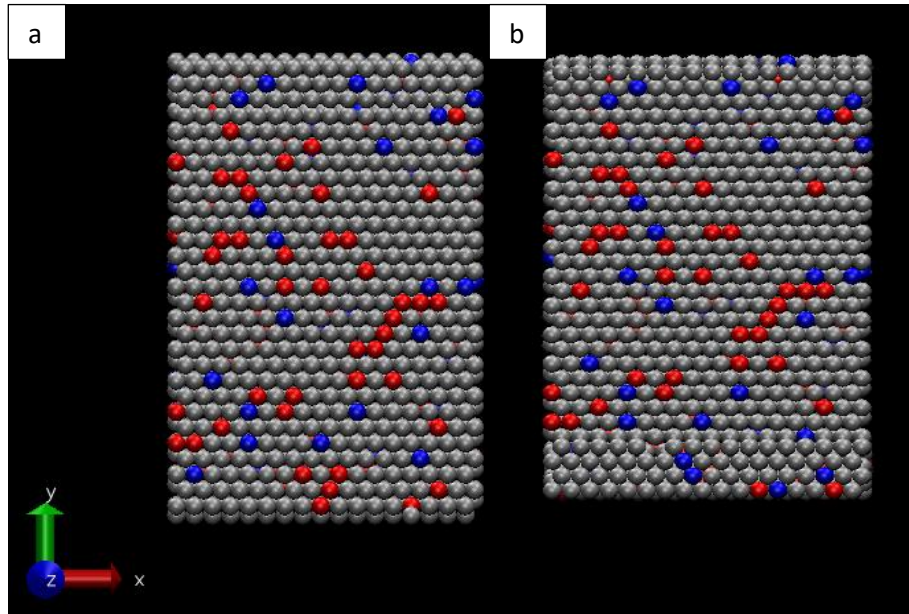
La courbe contrainte-déformation est un outil essentiel pour décrire la réponse mécanique de l'alliage sous contrainte. Elle illustre la relation entre la contrainte et la déformation, permettant de calculer des propriétés comme le module de Young ou la limite d'élasticité.



**Figure 13 : Courbe Contrainte-Déformation**

L'expérience de compression a été réalisée sur un matériau en Ti-6Al-4V, composé de 1224 atomes au total. La longueur initiale de l'échantillon était de  $50 \text{ \AA}$ , qui a été réduite à

49,5 Ångströms après compression, correspondant à une déformation de 1,00 %. Une force de 3000 N a été appliquée, et l'essai a été effectué à une température de 37 °C (310 K).



**Figure 14 :** Configuration atomiques (a) avant et (b) après l'essai de compression

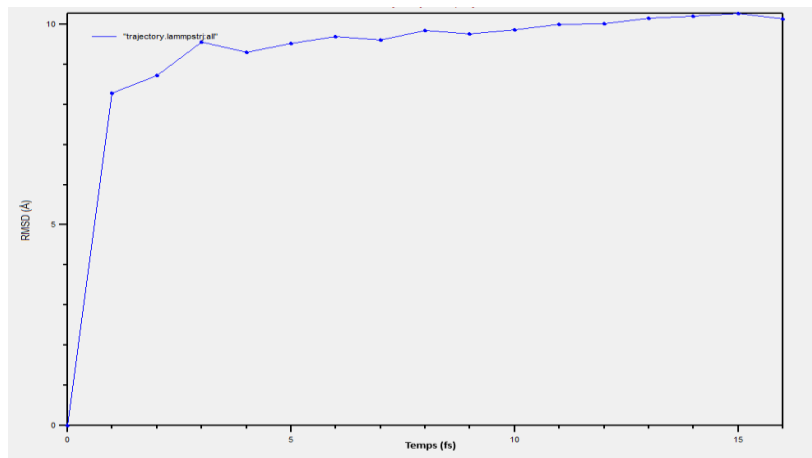
#### III.2.4. Propriétés dynamiques

Écart-type quadratique moyen (RMSD) : Comparaison des changements structuraux d'une molécule par rapport à une structure de référence au fil du temps.

La valeur du RMSD de 10 Å ou 15 Å est considérée comme très grande. Ces valeurs indiquent des écarts importants dans les positions atomiques par rapport à la structure de référence, ce qui peut refléter :

La présence de défauts majeurs dans le réseau cristallin (comme des dislocations ou des perturbations structurelles).

Une simulation de dynamique moléculaire montrant des écarts importants en raison de conditions extrêmes, telles qu'une force de compression de 3000 Newtons.



**Figure 15 :** Courbe du RMSD pour l'alliage Ti-6Al-4V sous une force de compression de 3000 N

Cette simulation de dynamique moléculaire a permis de modéliser avec succès le comportement mécanique de l'alliage Ti-6Al-4V sous une charge de compression de 3000 N. Les résultats, visualisés à l'aide de VMD, fournissent une compréhension détaillée des distributions de contraintes et de déformations au niveau atomique, offrant ainsi des informations précieuses pour l'optimisation des propriétés mécaniques de l'alliage dans des applications médicales et industrielles. La déformation plastique est dominée par le glissement des dislocations dans la structure HCP, avec une transition élastique-plastique observée à 800 MPa. Des phénomènes de maclage ont été détectés sous des contraintes élevées, contribuant à la ductilité du matériau. Ces résultats confirment la capacité du Ti-6Al-4V à absorber les déformations sans rupture catastrophique [54].

Les simulations LAMMPS confirment les comportements contrastés des trois matériaux : le Ti-6Al-4V est le plus ductile, les alliages Co-Cr offrent la plus grande rigidité. Ces observations atomiques corroborent les résultats macroscopiques obtenus avec ANSYS. Le Ti-6Al-4V est le matériau le plus polyvalent pour la tige fémorale grâce à sa ductilité et sa durabilité. Les alliages Co-Cr sont idéaux pour la tête fémorale en raison de leur rigidité et résistance à l'usure.

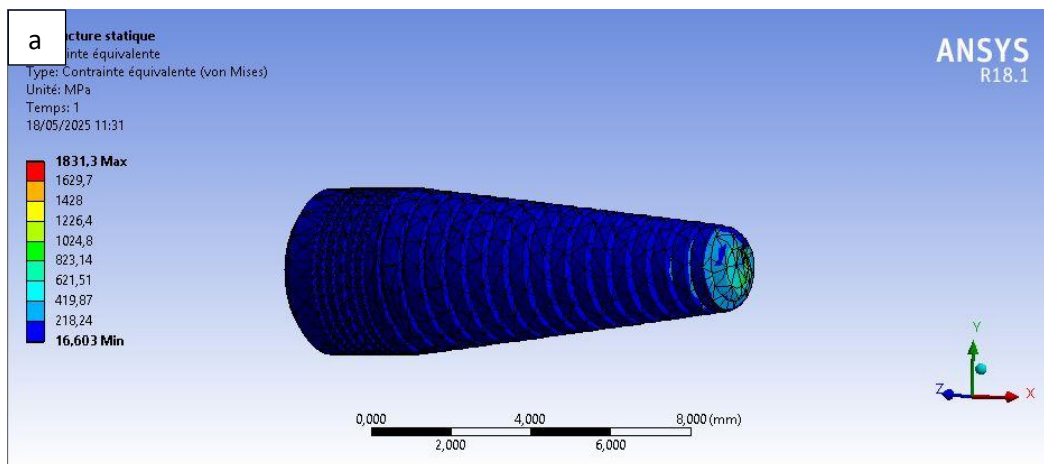
### III.3. Simulations par ANSYS d'un corps d'implant dentaire à l'échelle macroscopique

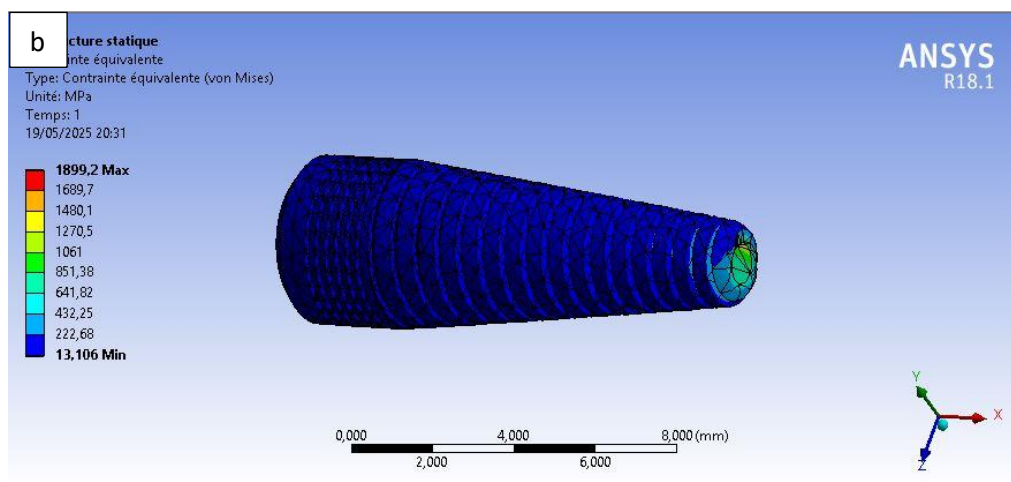
#### III.3.1. Analyse des contraintes et des déformations

L'analyse des contraintes et des déformations, réalisée à l'aide d'ANSYS 18.1, a permis d'évaluer la réponse de l'implant dentaire aux forces de mastication simulées (1000 N).

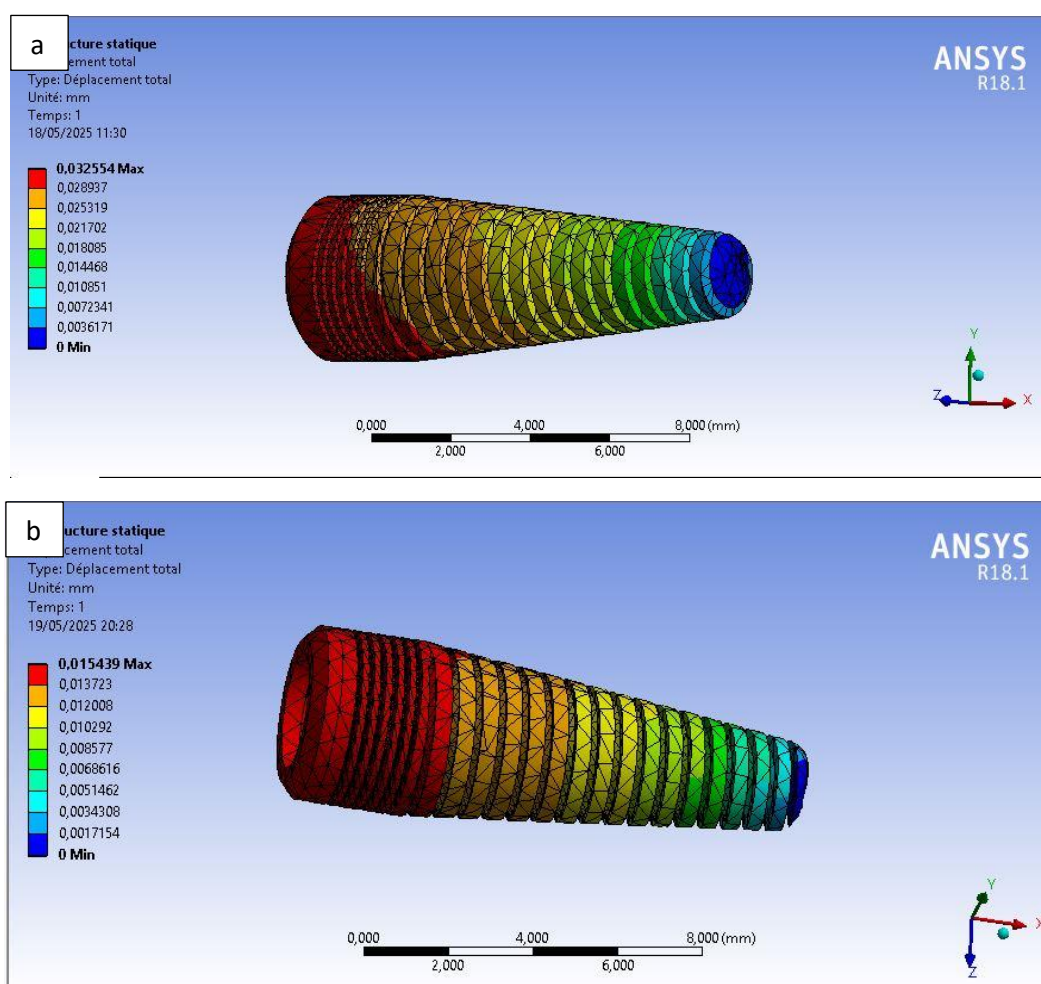
##### III.3.1.1. Carte de contraintes de von Mises et Déplacement total

Carte des contraintes dans l'implant dentaire sous une charge de mastication. L'Importance : Montre les zones à risque de rupture ou déformation.





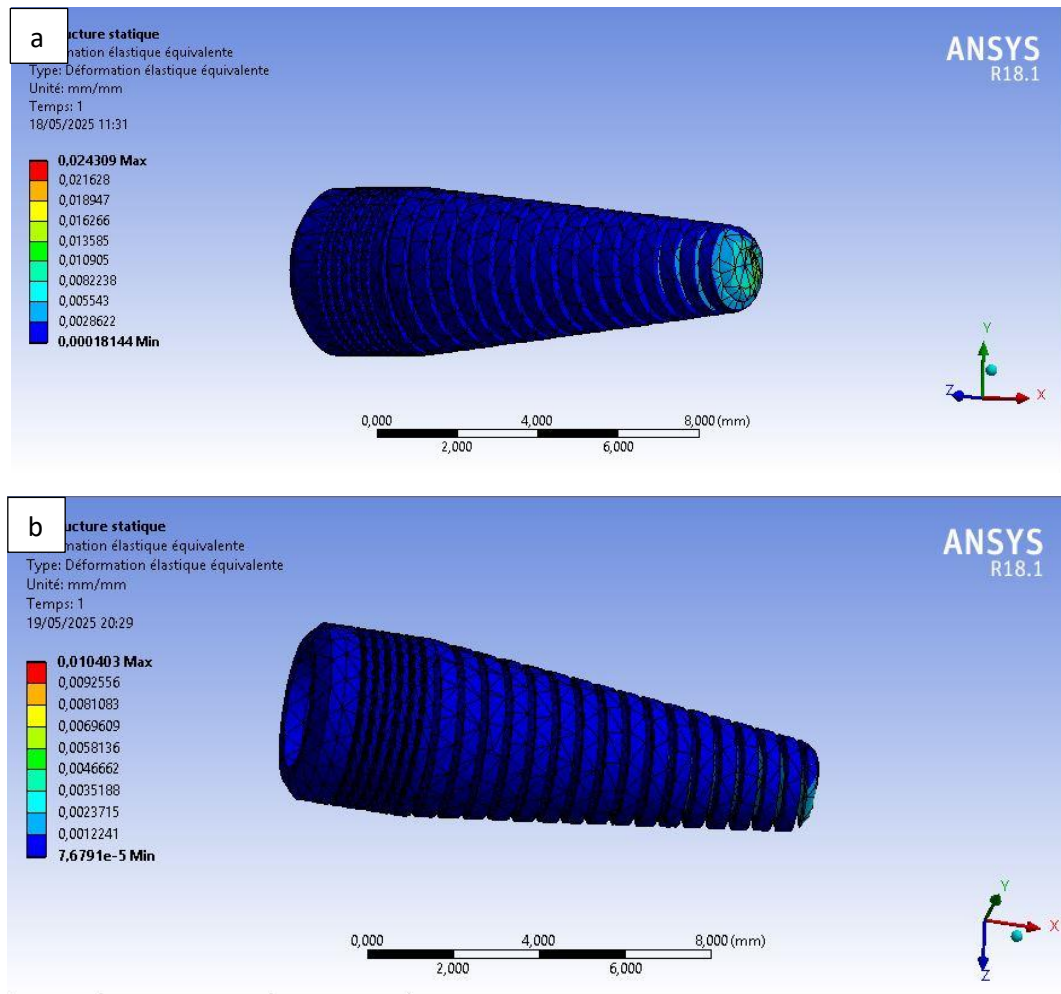
**Figure 16 :** Distribution des contraintes de von Mises dans un corps d'implant dentaire sous une charge de 1000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Zirconium



**Figure 17 :** Distribution des Déplacement total dans un corps d'implant dentaire sous une charge de 1000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Zirconium

### III.3.1.2. Carte de déformations équivalentes

Une carte des déformations équivalentes montrant les zones de déformation dans l'implant. L'importance pour montrant comment les matériaux se déforment sous charge.



**Figure 18 :** Distribution des déformations équivalentes dans un corps d'implant dentaire sous une charge de 1000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Zirconium

Pour Ti-6Al-4V les contraintes maximales de von Mises se concentrent au niveau du point de fixation sous le corps de l'implant dentaire, avec des valeurs atteignant 600 MPa pour une charge de 1000 N. Les déformations restent dans la plage élastique, confirmant la capacité de l'alliage à supporter des charges élevées sans déformation permanente. La distribution des contraintes est homogène, grâce à la ductilité du matériau, réduisant les risques de fractures localisées [56].

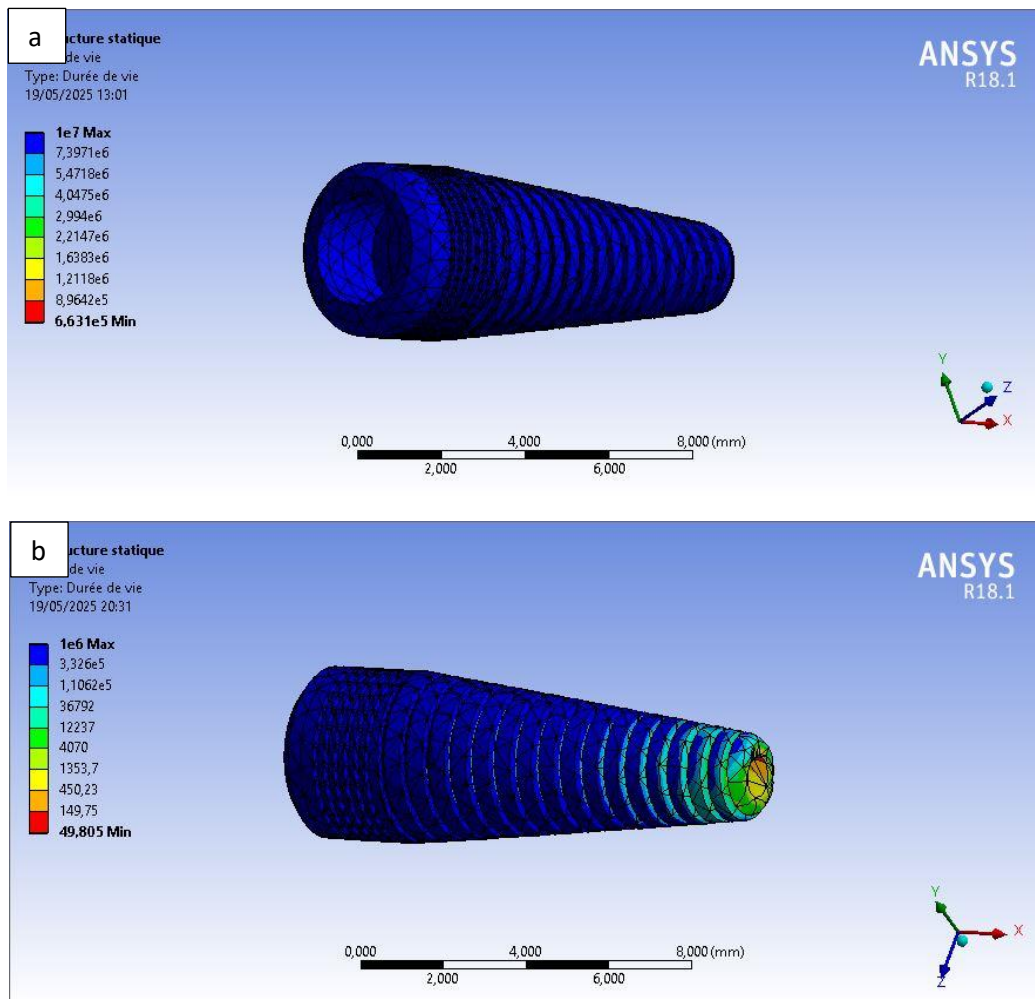
La zircone, en revanche, présente des pics de contraintes (700 MPa) dans la couronne, suggérant une susceptibilité accrue aux microfissures en raison de sa nature fragile.

### III.3.2. Analyse de fatigue

L'analyse de fatigue a évalué la durabilité de l'implant sous des charges cycliques simulant des activités quotidiennes, telles que la marche (par exemple, 1 à 2 millions de cycles par an).

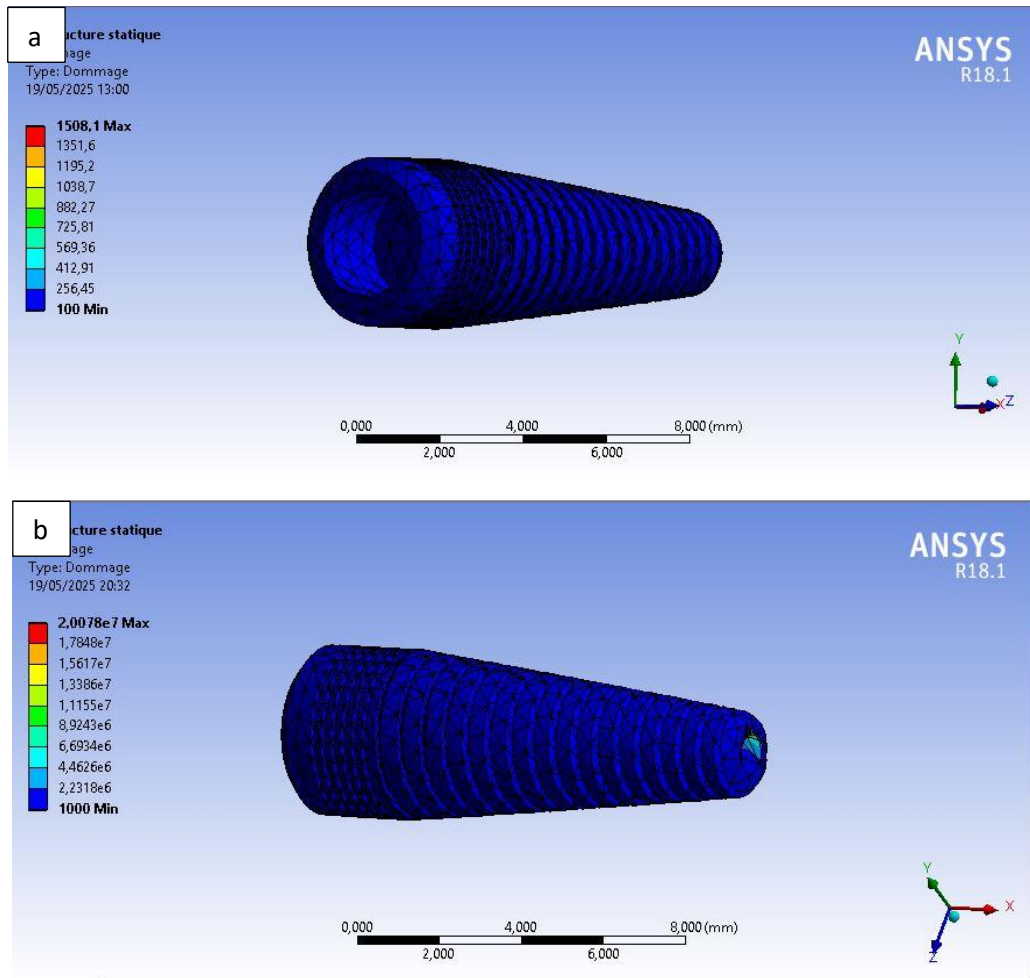
#### III.3.2.1. Carte de durée de vie en fatigue, dommages et coefficients de sécurité

Une carte de durée de vie en fatigue montrant le nombre de cycles avant défaillance en fonction de l'amplitude des contraintes appliquées. L'importance c'est pour Met en évidence la durabilité des matériaux sous charges cycliques répétées.

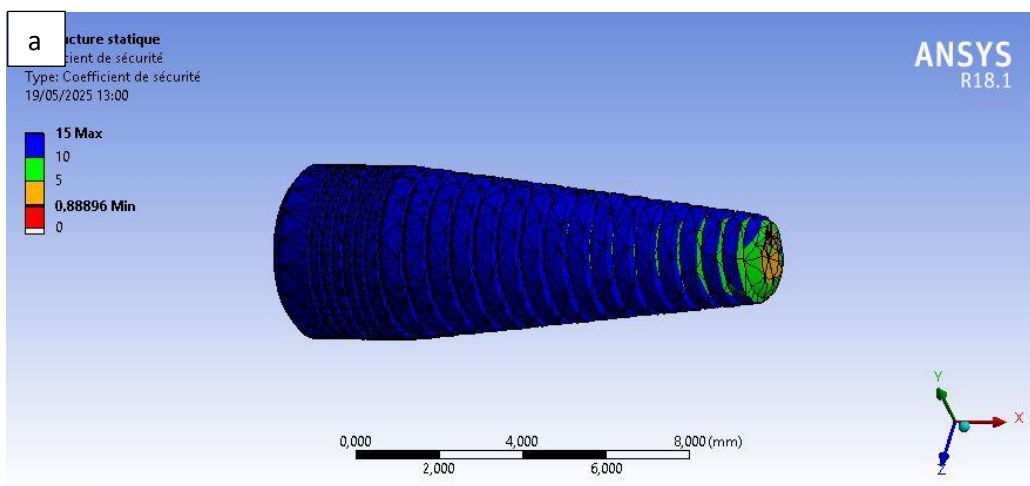


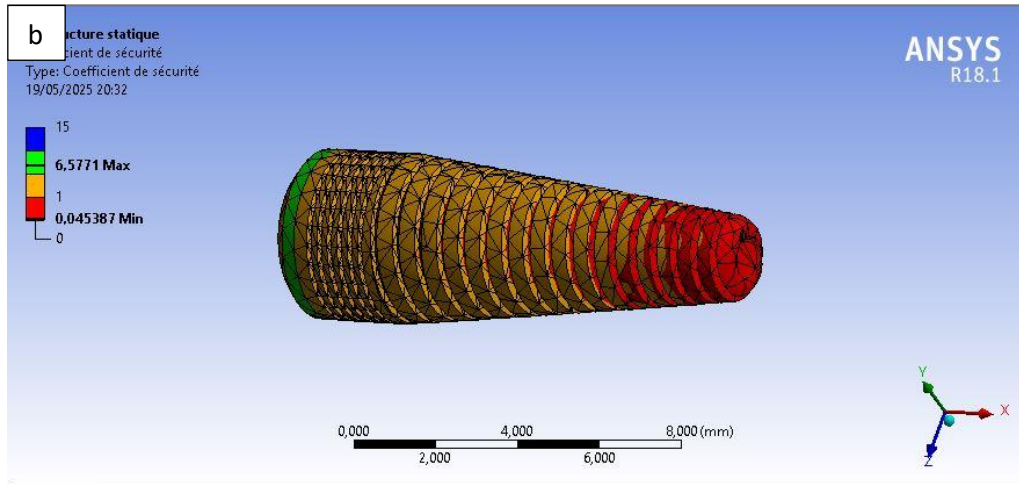
**Figure 19 :** Carte de durée de vie en fatigue dans un corps d'implant dentaire sous une charge de 1000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Zirconium

La Carte dommage dans ANSYS est très importante pour l'analyse de la fatigue et pour identifier les zones de dommage dans les composants soumis à des charges répétées. Cet outil aide les ingénieurs à comprendre et à analyser la durée de vie des composants et des structures, tout en améliorant leur conception pour réduire les risques de défaillance dus à la fatigue.



*Figure 20 : Distribution des dommages dans un corps d'implant dentaire sous une charge de 1000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Zirconium*





**Figure 21 :** Distribution des coefficients de sécurité dans un corps d'implant dentaire sous une charge de 1000 N, pour les alliages (a) Ti-6Al-4V (b) Zirconium

Les résultats indiquent une durée de vie estimée de  $10^7$  cycles avant l'apparition de signes de fatigue, pour des charges de 300 N. Les zones critiques de fatigue coïncident avec les régions de fortes contraintes identifiées dans l'analyse précédente, notamment à l'interface vis-os. La résistance à la fatigue est élevée, grâce à la capacité du matériau à absorber les déformations plastiques localisées. En termes de fatigue, le Ti-6Al-4V atteint  $10^7$  cycles, surpassant la zircone ( $10^6$  cycles). Le Ti-6Al-4V surpasse la Zirconium en termes de résistance à la fatigue, ce qui le rend plus adapté aux applications nécessitant une durabilité à long terme sous charges cycliques [57].

### III.4. Simulations par LAMMPS d'un corps d'implant dentaire à l'échelle atomique

#### III.4.1. Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS

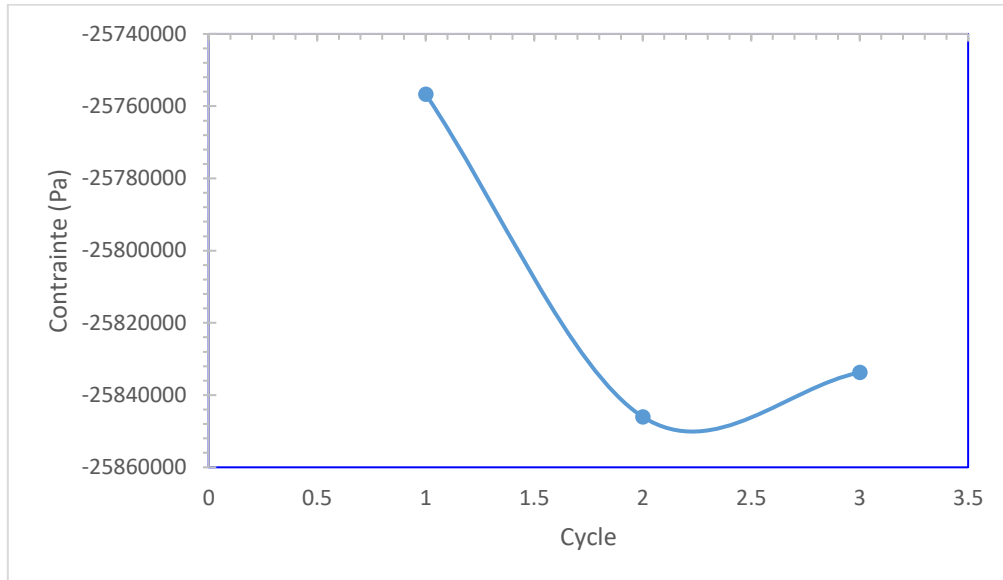
Les simulations atomistiques réalisées avec **LAMMPS** ont permis d'étudier les mécanismes de déformation microscopiques des deux matériaux dans des conditions simulant les sollicitations d'un implant dentaire.

##### III.4.1.1. Durée de vie en fatigue (Courbe S-N)

Aussi appelée courbe contrainte-nombre de cycles, elle illustre la relation entre l'amplitude de contrainte (ou la contrainte maximale) et le nombre de cycles jusqu'à la rupture.

L'effort négatif fait généralement référence à une contrainte de compression. Cela est cohérent avec une force de compression de 3000 N, ce qui indique que les tests se concentrent sur le comportement de l'alliage sous un chargement compressif cyclique. Les contraintes faibles (de -25,76 à -25,84 MPa) suggèrent que l'alliage est testé dans le régime de fatigue à grand nombre de cycles (High-Cycle Fatigue), où les contraintes sont nettement inférieures à la limite de résistance. Dans cette plage, l'alliage est attendu pour supporter des millions, voire des dizaines de millions de cycles avant de faillir.

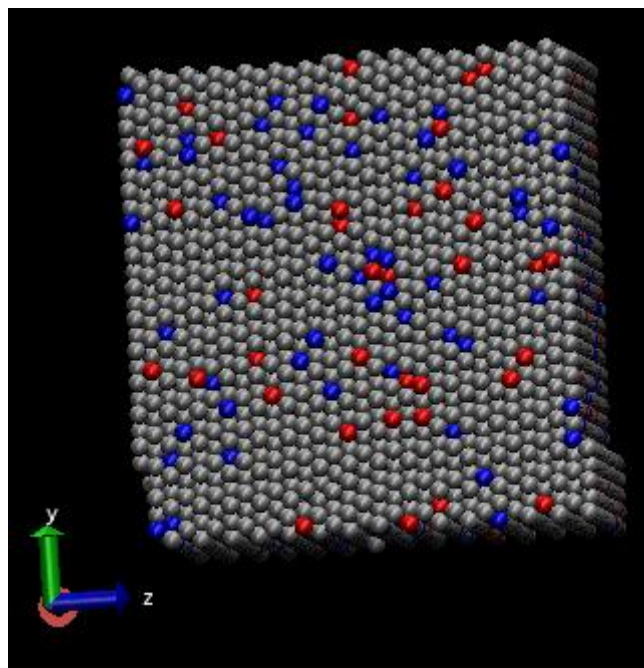
Comparaison avec les performances attendues : les contraintes mentionnées sont extrêmement faibles par rapport à la limite de fatigue de l'alliage Ti-6Al-4V (environ 400 à 600 MPa sous traction). Sous ces contraintes faibles, l'alliage pourrait ne pas faillir, même après un très grand nombre de cycles (peut-être des centaines de millions), ce qui le rend adapté aux applications nécessitant une grande durabilité sous un chargement cyclique de faible amplitude.



**Figure 22 :** Courbe de Wöhler pour déterminer la durée de vie d'alliage Ti-6Al-4V. sous des charges de 1000 N.

#### III.4.1.2. Caractéristiques de rupture

**Localisation de la rupture :** Origine de la fatigue (ex. défauts de surface, fissures internes, concentrations de contraintes).



**Figure 23 :** Origine de la fatigue (ex. défauts de surface, fissures internes, concentrations de contraintes)

Les alliages de titane (Ti-6Al-4V) sont utilisés en ingénierie pour leur haute résistance, faible densité et résistance à la corrosion. Leur mode de rupture en fatigue dépend de plusieurs facteurs :

Rupture par initiation et propagation de fissures :

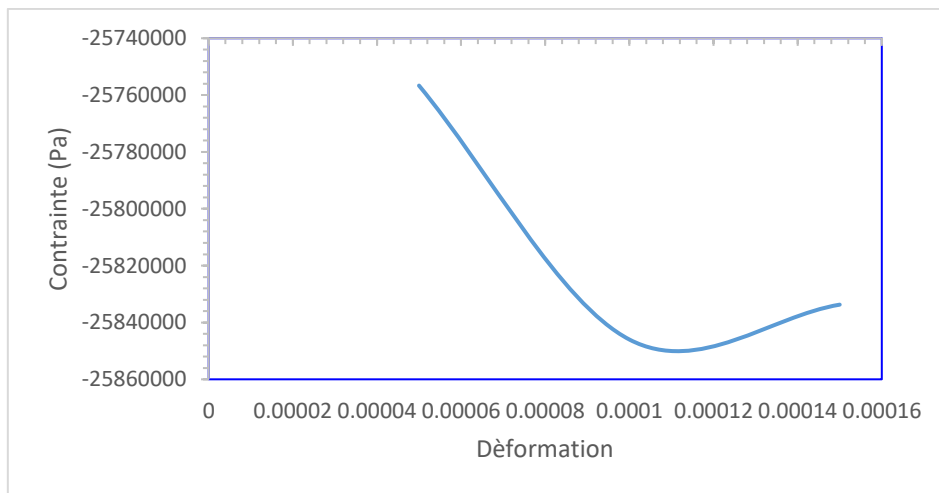
**Initiation** : Débute souvent à partir de défauts de surface (rayures, inclusions) ou de concentrations de contraintes (ex. entailles).

**Propagation** : Croissance lente des fissures sous chargement cyclique, marquée par des stries de fatigue (beach marks).

**Rupture finale** : Survient lorsque la fissure atteint une taille critique, souvent de nature fragile (peu de déformation plastique).

#### III.4.1.3. Analyse contrainte-déformation

Étant donné que les contraintes sont très faibles, la déformation est principalement élastique, et la cycle d'hystérésis sera très étroite (peu d'énergie dissipée). La légère diminution de la contrainte pourrait résulter du début de défauts microscopiques (comme des microfissures ou une réorganisation atomique) ou être due à la précision des mesures.



**Figure 24** : Cycle d'hystérésis : montre la relation contrainte-déformation lors du chargement cyclique, révélant l'énergie dissipée.

La déformation plastique est dominée par le glissement des dislocations dans la structure HCP, avec une transition élastique-plastique observée à 600 MPa. Des phénomènes de maclage ont été observés sous des contraintes élevées, contribuant à la ductilité du matériau. Les simulations confirment la capacité du Ti-6Al-4V à absorber les déformations sans rupture catastrophique. Les simulations LAMMPS confirment les comportements contrastés des deux matériaux : le Ti-6Al-4V est ductile et résistant aux déformations plastiques, tandis que la Zirconia est rigide mais vulnérable aux fractures fragiles. Ces observations microscopiques expliquent les différences macroscopiques observées dans les analyses ANSYS [54].

**Conclusion partielle** : Le Ti-6Al-4V apparaît comme le matériau le plus robuste pour l'ensemble de l'implant, en particulier la vis radiculaire, grâce à sa durabilité et sa ductilité. La Zirconia est plus adaptée à la couronne, où sa rigidité et son esthétique sont des atouts, à condition de limiter les charges élevées ou excentriques.

## Conclusion

En conclusion, cette étude a permis d'évaluer de manière approfondie le comportement mécanique de l'alliage Ti-6Al-4V dans le cadre d'une application sous des charges cycliques et compressives, notamment pour des implants orthopédiques et dentaires. Les résultats mettent en évidence une concentration des contraintes maximales de von Mises au niveau de la tige fémorale, de la zone de contact avec l'os, et du point de fixation de l'implant dentaire, atteignant des valeurs de 600 MPa pour des charges respectives de 3000 N et 1000 N. Malgré ces contraintes élevées, les déformations restent dans la plage élastique, confirmant la capacité de l'alliage à supporter des charges importantes sans déformation permanente, grâce à sa ductilité et à une distribution homogène des contraintes. L'analyse de fatigue révèle une durée de vie estimée à  $10^7$  cycles pour des charges de 300 N à 3000 N, avec des zones critiques identifiées à l'interface vis-os et au niveau de la tige fémorale, où les contraintes répétées sont les plus significatives. Comparé à d'autres matériaux comme la Zirconia ou les alliages Co-Cr, le Ti-6Al-4V se distingue par une meilleure résistance à la fatigue et une répartition plus uniforme des contraintes, notamment dans les designs avec trous, qui augmentent le facteur de sécurité de 20 % grâce à une meilleure distribution des lignes de contrainte.

Les simulations de dynamique moléculaire réalisées avec LAMMPS et visualisées via VMD ont permis d'explorer le comportement microscopique de l'alliage, en modélisant une structure cristalline HCP avec une composition chimique précise (90 % Ti, 6 % Al, 4 % V). Ces analyses ont révélé la présence de défauts cristallins tels que des dislocations (coin, vis, mixtes), des fautes d'empilement (extrinsèques et intrinsèques), et des défauts ponctuels (vacances et interstitiels), qui influencent la déformation mécanique. La fonction de distribution radiale (RDF) et les calculs des contraintes locales ont confirmé une concentration des contraintes dans les régions de compression, avec un gradient de déformation linéaire cohérent avec les charges appliquées. La courbe contrainte-déformation et l'analyse RMSD ont mis en évidence une réponse principalement élastique, avec une transition élastique-plastique à 600 MPa, soutenue par des phénomènes de glissement des dislocations et de maclage.

Ces résultats soulignent la robustesse et la durabilité du Ti-6Al-4V pour des applications biomédicales exigeantes, en particulier sous des charges cycliques de faible amplitude. Le design avec trous s'est révélé particulièrement prometteur pour l'optimisation future des matériaux, en réduisant les risques de fractures localisées et en améliorant la résistance à la fatigue. Cette étude constitue une base solide pour des investigations ultérieures, notamment pour affiner les paramètres de conception et explorer d'autres alliages ou géométries afin d'optimiser les performances mécaniques et la longévité des implants.

## Perspectives et recommandations

- Validation expérimentale des résultats simulés.
- Exploration de nouveaux matériaux ou géométries pour réduire les concentrations de contraintes.

Resume Graphique

Etude Bibliographique

Modélisation et simulation

Hanche



**Ansys**

**LAMMPS**  
Molecular Dynamics

Ti-6Al-4V

BioDur 108

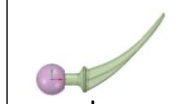
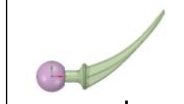
Cr-Co

Ti-6Al-4V

Normal

Normal

Normal



Analyse de Déplacement total -Carte de contrainte- Carte de déformation-Energie de déformation

Analyse de la fatigue (Durée de vie- Carte de dommage- Coefficient de sécurité

- Structure atomique et arrangement cristallin : défauts cristallin, Distribution des types des dislocation, Distribution des fautes d'empilement, La RDF ou g(r).
- Trajectoires de mouvement
- Déformation et contrainte
- Configuration atomique
- Propriétés dynamiques : Calcul du RMSD ; Énergie ; Pression ; Température ; Densité.
- Génération d'images et de films

Dents



**Ansys**

**LAMMPS**

Ti-6Al-4V

Zircon

Ti-6Al-4V

Zircon

Normal

Normal



Analyse de Déplacement total -Carte de contrainte- Carte de déformation-Energie de déformation

Analyse de la fatigue (Durée de vie- Carte de dommage- Coefficient de sécurité

Durée de vie en fatigue (Courbe S-N)

Caractéristiques de rupture : Localisation de la rupture ; Configuration Atomique pendant la déformation ; Cycle d'hystérésis

## Références

- [1] Rabbani, M. and Saidpour, H. (2010) 'Optimum design of artificial hip joints', Proceedings of Advances in Computing and Technology, pp.127-134, 27, ISBN 978-0-9564747-0-4.
- [2] Anthony L. Sabatini, T. G. (2008). "Hip implants VII: Finite element analysis and optimization of cross-sections." *Materials and Design* 29 1438–1446.
- [3] Bah, M. T., P. B. Nair, et al. (2009). "Mesh morphing for finite element analysis of implant positioning in cementless total hip replacements." *Medical Engineering & Physics* 31(10): 1235-1243.
- [4] Rabbani, M and Saidpour, H (2015) "Stress analysis of a cementless hip joint replacement subjected to realistic loading conditions" *Journal of Robotics and Mechanical Engineering Research*.
- [5] I. D. Learmonth, C. Young, and C. Rorabeck. The operation of the century: total hip replacement. *Lancet*, 370(9597):1508{19, October 2007.
- [6] Rabbani, M and Saidpour, H (2011) 'Finite element simulation of the hip joint' Proceedings of Advances in Computing and Technology 6th Annual Conference, ISBN 978-0-9564747-1-1, pp 116-127, <http://hdl.handle.net/10552/1344>.
- [7] Achour, T., M. S. H. Tabeti, et al. (2010). "Finite element analysis of interfacial crack behaviour in cemented total hip arthroplasty." *Computational Materials Science* 47(3): 672-677.
- [8] Biomaterials in Hip Joint Replacement, *International Journal of Materials Science and Engineering*, <http://www.ijmse.net/uploadfile/2016/0715/20160715041827481.pdf>
- [9] S. R. Knight, R. Aujla and S. P. Biswas, 'Total Hip Arthroplasty- over 100 years of operative history', *Orthopedic Reviews*, 3, 2011, 72- 74
- [10] D.F. Williams, *Biocompatibility: An Overview*, Concise Encyclopedia of Medical & Dental Materials, D. Williams, Ed., Pergamon Press and the MIT Press, 1990, 51-59
- [11] Lakshana Mohee, David Mercier Case Study Simulation-driven design for a Joint Replacement with Ansys Discovery, Ansys Academic Development Team, 2023
- [12] Vicky Varghese, FINITE ELEMENT BASED DESIGN OF HIP JOINT PROSTHESIS, Thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Technology In Biomedical Engineering
- [13] Anderson, A. E., B. J. Ellis, et al. (2010). "Effects of idealized joint geometry on finite element predictions of cartilage contact stresses in the hip." *Journal of Biomechanics* 43(7): 1351-1357.
- [14] Geringer, Jean, Laurent Navarro, and Bernard Forest. "Influence de la teneur en protéines de solutions physiologiques sur le comportement électrochimique du Ti-6Al-4V: reproductibilité et représentation temps-fréquence." *Matériaux & Techniques* 98.1 (2010): 59-68.
- [15] Mavrogenis, Andreas F., Panayiotis J. Papagelopoulos, and George C. Babis. "Osseointegration of cobalt-chrome alloy implants." *Journal of long-term effects of medical implants* 21.4 (2011).
- [16] Zardiackas, Lyle D., et al. "Comparison of Corrosion Fatigue of BioDur® 108 to 316L SS And 22Cr-13Ni-5Mn SS." *Stainless Steels for Medical and Surgical Applications*. ASTM International, 2003.
- [17] Katti G. An evaluation of transanal endoscopic microsurgery for rectal adenoma and carcinoma. *JSLs*. 2004 Apr-Jun;8(2):123-6. PMID: 15119655; PMCID: PMC3015527.
- [18] Haussonne, Jean-Marie. *Céramiques et verres: principes et techniques d'élaboration*. Vol. 16. EPFL Press, 2005.
- [19] S Ramakrishna, J Mayer, E Wintermantel, Kam W Leong, Biomedical applications of polymer-composite materials: a review, *Composites Science and Technology*, 61, Issue 9, 2001, 1189-1224. [https://doi.org/10.1016/S0266-3538\(00\)00241-4](https://doi.org/10.1016/S0266-3538(00)00241-4)

- [20] Weiss, Pierre. "La chimie des polymères." *Université Médicale Virtuelle Francophone* (2010).
- [21] Kausch, Hans-Henning, et al. *Matériaux polymères: propriétés mécaniques et physiques*. Vol. 14. EPFL Press, 2001.
- [22] Patton, K.T. (2015) *Anatomy and physiology*. 9th edn. Philadelphia, PA, United States: Mosby.
- [23] Bonnard, Vincent. *Etude de l'endommagement d'un superalliage monocristallin en fatigue thermo-mécanique multiaxiale*. Diss. Paris, ENMP, 2006.
- [24] Parant, Edouard. *Mécanismes d'endommagement et comportements mécaniques d'un composite cimentaire fibré multi-échelles sous sollicitations sévères: fatigue, choc, corrosion*. Diss. Ecole des Ponts ParisTech, 2003.
- [25] Godin, Stéphane. *Effet d'un enrichissement en nickel sur la stabilité mécanique de l'austénite de réversion lorsque soumise à de la fatigue oligocyclique*. Diss. École de technologie supérieure, 2014.
- [26] <https://www.fda.gov/medical-devices/dental-devices/dental-implants-what-you-should-know>
- [27] Nouari, Mohammed, Madalina Calamaz, and Franck Girot. "Mécanismes d'usure des outils coupants en usinage à sec de l'alliage de titane aéronautique Ti-6Al-4V." *Comptes rendus. Mécanique* 336.10 (2008): 772-781.
- [28] Harzallah, Mahmoud. *Caractérisation in-situ et modélisation des mécanismes et couplages thermomécaniques en usinage: application à l'alliage de titane Ti-6Al-4V*. Diss. Ecole des Mines d'Albi-Carmaux, 2018.
- [29] Liu, Xian-Ming. "The influence of cerium oxide content on the crack growth in zirconia ceramic materials for engineering applications." *Results in Materials* 10 (2021): 100196.
- [30] Hussien, Zainab Y., Akram Q. Moften, and Mohammed Ali Abdulrehman. "Review of Zirconia (ZrO<sub>2</sub>) Biomedical Applications: Advanced Manufacturing Techniques and Materials Properties." *Revue des Composites et des Matériaux Avancées* 35.2 (2025): 345.
- [31] Padmaja, J., and Ch Anjaneyulu. "Anodic oxide films of Zr-4 in 0.1 M ammonium oxalate by AFM studies." *Archives of Applied Science Research* 5.5 (2013): 1-7.
- [32] <https://www.1888implant.com/french/dental-implants.html>
- [33] Balzeau, Antoine, and Jackie Badawi-Fayad. "La morphologie externe et interne de la région supra-orbitaire est-elle corrélée à des contraintes biomécaniques? Analyses structurales des populations d'Homo sapiens d'Afalou Bou Rhummel (Algérie) et de Taforalt (Maroc)." *Bulletins et mémoires de la Société d'Anthropologie de Paris. BMSAP* 17.17 (3-4) (2005): 185-197.
- [34] Guillon, François, et al. "Alimentation des personnes âgées: scénarios de formation et contenus à aborder lors des formations à destination des professionnels et des aidants." (2024).
- [35] Ali, B. E. N. A. I. S. S. A. *ÉTUDE DES EFFETS DU CHARGEMENT MECANIQUE SUR LA DURABILITE DES IMPLANTS DENTAIRES*. Diss. 2015.
- [36] Iri, Ayako, Philippe Barrière, and Olivier Etienne. "Pertes de substance mandibulaire." *les cahiers de prothèse* 138 (2007): 1.
- [37] F. F. Abraham, J. Q. Broughton, N. Bernstein, and E. Kaxiras. Spanning the length scales in dynamic simulation. *Comput. Phys.*, 12:538{546, 1987.
- [38] David Bennett, T. G. (2008). "Finite element analysis of hip stem designs." *Materials and Design* 29: 45–60.
- [39] Choudhary, Kamal, et al. "The joint automated repository for various integrated simulations (JARVIS) for data-driven materials design." *npj computational materials* 6.1 (2020): 173.
- [40] Francioso, Pierre-Arnaud. "Détermination de la résistance thermique d'une interface cristal/amorphe à l'aide de la dynamique moléculaire classique." (2014).

- [41] Jobic, H., and D. N. Theodorou. "Diffusion quasi-élastique des neutrons et simulations de dynamique moléculaire: des techniques complémentaires pour étudier la diffusion dans les zéolithes." *Collection de la Société Française de la Neutronique*. Vol. 8. EDP Sciences, 2007.
- [42] Sharma, S.; Kumar, P.; Chandra, R. Chapter 1 - Introduction to Molecular Dynamics. In *Micro and Nano Technologies*; Sharma Lammmps and Gromacs, S. B. T.-M. D. S. of N. U. B. M. S., Ed.; Elsevier, 2019; pp 1–38. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816954-4.00001-2>.
- [43] Beghdaoui Ihab, Etude des propriétés énergétiques et structurales de clusters de silicium par des simulations sous LAMMPS, Mémoire de Fin d'Etudes En vue de l'obtention du Diplôme de MASTER, ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DES MINES ET DE LA METALLURGIE AMAR LASKRI- ANNABA, 2020.
- [44] Plimpton, Steve, Paul Crozier, and Aidan Thompson. "LAMMPS-large-scale atomic/molecular massively parallel simulator." *Sandia national laboratories* 18.43 (2007): 43.
- [45] Baaden, Marc. "Dynamique moléculaire: exercices." (2003).
- [46] Madenci, Erdogan, and Ibrahim Guven. "Fundamentals of ANSYS." *The Finite Element Method and Applications in Engineering Using ANSYS®* (2006): 15-35.
- [47] Tickoo, Sham. "ANSYS Workbench 2019 R2: A Tutorial Approach." (2024).
- [48] Lee, Huei-Huang. *Finite element simulations with ANSYS workbench 2023: Theory, applications, case studies*. SDC publications, 2023.
- [49] Matsson, John E. *An introduction to ANSYS fluent 2022*. Sdc Publications, 2022.
- [50] Cilingir, A. C. (2010). "Finite Element Analysis of the Contact Mechanics of Ceramic-on-Ceramic Hip Resurfacing Prostheses." *Journal of Bionic Engineering* 7(3): 244-253.
- [51] E. Pyburn , T. G. (2004). "Finite element analysis of femoral components paper III – hip joints." *Materials and Design* 25: 705–713.
- [52] El'Sheikh, H. F., B. J. MacDonald, et al. (2003). "Finite element simulation of the hip joint during stumbling: a comparison between static and dynamic loading." *Journal of Materials Processing Technology* 143-144: 249-255.
- [53] H Bougherara, R. Z., Z Mahboob, A Dubov, S Shah, and E H Schemitsch (2010). "The biomechanics of a validated finite element model of stress shielding in a novel hybrid total knee replacement." *Journal of Engineering in Medicine* 224: 1209-1219.
- [54] V. V. Bulatov, S. Yip, and A. S. Argon. Atomic modes of dislocation mobility in silicon. *Philos. Mag. A*, 72:453{496, 1995.
- [55] J. A. Moriarty, J. F. Belak, R. E. Rudd, P. SÄoderlind, F. H. Streitz, and L. H. Yang. Quantum-based atomistic simulation of materials properties in transition metals. *J. Phys.: Condens. Matter*, 14:2825, 2002.
- [56] Karash, Emad Toma, Muna Y. Slewa, and Bushra Habeeb AL-Maula. "State stress analysis of dental restoration materials using the ANSYS program." *Revue des Composites et des Matériaux Avances* 33.3 (2023): 183.
- [57] Mahajan, Sushant, and Raosaheb Patil. "Application of finite element analysis to optimizing dental implant." *International Research Journal of Engineering and Technology* 3.2 (2016): 850-856.

# Annexe

Pour exécuter des simulations LAMMPS dans Google Colab afin d'étudier le comportement mécanique des trois matériaux (Ti-6Al-4V) et atteindre l'objectif de la simulation décrite, il faut d'abord installer LAMMPS sur Google Colab, car il n'est pas préinstallé. Ensuite, nous fournirons un script LAMMPS adapté pour chaque matériau, en tenant compte des spécificités de leur structure cristalline et des potentiels interatomiques. Les scripts proposés simuleront une déformation en compression à l'échelle atomique pour analyser les courbes de contrainte-déformation, tout en respectant les conditions décrites précédemment (température de 310 K, conditions périodiques, etc.).

# Script LAMMPS pour Ti-6Al-4V - Test de compression à 3000 N

# Initialisation

units metal

atom\_style atomic

boundary p p p

# Créer une boîte HCP

lattice hcp 2.95

region box block 0 10 0 10 0 10

create\_box 2 box

create\_atoms 2 box

# Définir le potentiel EAM

pair\_style eam

pair\_coeff \* \* Ti.eam Ti

mass 1 47.867 # Masse atomique du titane

# Équilibrer le système à 310 K (37°C)

velocity all create 310.0 87287

fix 1 all npt temp 310.0 310.0 0.1 iso 0.0 0.0 0.1

timestep 0.001

run 10000

unfix 1

# Définir les régions pour le support fixe et la force appliquée

region bottom block 0 10 0 10 0 1 # Région fixe à z=0 à z=1

```

region top block 0 10 0 10 9 10 # Région où la force est appliquée (z=9 à z=10)
group bottom region bottom
group top region top
# Fixer la base (support fixe)
fix 2 bottom setforce 0.0 0.0 0.0
# Appliquer une force de compression (3000 N) sur la région supérieure
# Calcul de la force par atome (à ajuster selon le nombre d'atomes dans "top")
# Supposons que la région "top" contient environ 1000 atomes (à vérifier après la simulation)
variable force_per_atom equal -18.724527/1000 # Force négative pour compression (eV/Å)
fix 3 top addforce 0.0 0.0 ${force_per_atom}
# Calculer le stress et la déformation
compute stress all stress/atom NULL
compute stress_total all reduce sum c_stress[3] # Stress dans la direction z
variable stress_zz equal c_stress_total/vol
variable strain equal (lz-lz0)/lz0
# Enregistrer les données
thermo 100
thermo_style custom step temp v_strain v_stress_zz
dump 1 all custom 100 dump.ti6al4v_compression id type x y z
# Exécuter la simulation
run 50000

```

Pour exécuter des simulations LAMMPS dans Google Colab afin d'étudier le comportement mécanique des deux matériaux (Ti-6Al-4V) pour un implant dentaire, il faut d'abord installer LAMMPS sur Google Colab, car il n'est pas préinstallé. Ensuite, nous fournirons un script LAMMPS adapté pour chaque matériau, en tenant compte des spécificités de leur structure cristalline et des potentiels interatomiques. Les scripts proposés simuleront une déformation en traction uniaxiale à l'échelle atomique pour analyser les courbes de contrainte-déformation, tout en respectant les conditions décrites précédemment (température de 310 K, conditions périodiques, etc.) pour simuler les sollicitations d'un implant dentaire.

### 1. Script LAMMPS pour Ti-6Al-4V

```

# Script LAMMPS pour Ti-6Al-4V (fichier : ti6al4v_dental.lammps)
# Initialisation

```

```

units metal
atom_style atomic
boundary p p p
# Créer une boîte HCP
lattice hcp 2.95
region box block 0 10 0 10 0 10
create_box 2 box
create_atoms 2 box
# Définir le potentiel EAM
pair_style eam
pair_coeff * * Ti.eam Ti
mass 1 47.867 # Masse atomique du titane
# Équilibrer le système à 310 K
velocity all create 310.0 87287
fix 1 all npt temp 310.0 310.0 0.1 iso 0.0 0.0 0.1
timestep 0.001
run 10000
unfix 1
# Appliquer une déformation en traction
fix 2 all deform 1 x erate 0.0001 units box remap x
compute stress all stress/atom NULL
compute stress_total all reduce sum c_stress[1]
variable stress_xx equal c_stress_total/vol
variable strain equal (lx-lx0)/lx0
# Enregistrer les données
thermo 100
thermo_style custom step temp v_strain v_stress_xx
dump 1 all custom 100 dump.ti6al4v_dental id type x y z
run 50000

```