

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 : Construction Mécanique

Mémoire

Présenté en vue de l'obtention du Diplôme de Master

Thème:

Conception et modélisation d'implants médicaux avancés par intégration de la dynamique moléculaire et de l'analyse par éléments finis : Approche multi-échelle pour l'optimisation des performances biomécaniques

Présenté par : BEKKOUCHE Kaouther

Encadrant : Bougoffa Med Seyf Eddine

Grade : MCB

Université : UBMA

Jury de soutenance :

Nom et prénom	Grade	Université	Président
Bougoffa Med Seyf Eddine	MCB	UBMA	Encadrant
Nom et prénom	Grade	UBMA	Examinateur
Nom et prénom	Grade	UBMA	Examinateur

Année Universitaire : 2024/2025

Table des matières

Dédicaces	4
Remerciements	5
Résumé	6
Introduction générale	9
Chapitre 1 : Les implants de hanche et dentaires – État de l'Art	11
I. Introduction	12
I.1. Implants de hanche	12
I.1.1. Matériaux des implants de hanche	13
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
I.2. Implants dentaires	19
I.2.1. Avantages et risques des implants dentaires	21
I.2.2. Matériaux typiques des implants dentaires	21
I.2.3. Les types d'implant dentaires	22
I.2.4. Contraintes spécifiques liées à la mastication	23
I.3. Simulations numériques	23
I.3.1 Dynamique moléculaire (MD) avec LAMMPS	24
I.3.1.1. Principes	24
I.3.1.2. Avantages de LAMMPS pour l'échelle atomique	27
I.3.2. Analyse par éléments finis (FEA) avec ANSYS	28
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 : Modélisation et simulation multi-échelle des implants de hanche et dentaires avec ANSYS et LAMMPS	34
II.1. Introduction	36
II.2. Simulations avec ANSYS (l'analyse par éléments finis)	36
II.2.1. Les implants de hanche	36
II.2.1.1. Analyse des contraintes et des déformations (Stress and Strain Analysis)	36
II.2.1.2. Analyse de fatigue	39
II.3. Simulations avec LAMMPS (la dynamique moléculaire)	39
II.3.1. Les implants de hanche	39

II.3.1.1 Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS	39
II.4. Simulations avec ANSYS (l'analyse par éléments finis)	41
II.4.1. Les implants dentaires	41
1. Analyse des contraintes et des déformations	41
2. Analyse de fatigue.....	43
II.5. Simulations avec LAMMPS (la dynamique moléculaire).....	44
II.5.1. Les implants dentaires	44
II.5.1.1. Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS.....	44
Chapitre 3 : Résultats et discussion	45
III.1. Simulation par ANSYS de l'implant de hanche à l'échelle macroscopique	46
III.1.1. Analyse des contraintes et des déformations.....	46
III.1.1.1. Carte de contraintes de von Mises et Déplacement total.....	46
III.1.1.2. Carte de déformations équivalentes.....	49
III.1.2. Analyse de fatigue	50
III.1.2.1. Carte de durée de vie en fatigue, distribution des dommages et coefficients de sécurité	50
III.2. Simulations par LAMMPS de l'implant de hanche à l'échelle Atomique	55
III.2.1. Structure atomique et arrangement cristallin	55
III.2.2. Trajectoires de mouvement	58
III.2.3. Déformation et contrainte	59
III.2.4. Propriétés dynamiques	60
III.3. Simulations par ANSYS d'un corps d'implant dentaire à l'échelle macroscopique	61
III.3.1. Analyse des contraintes et des déformations.....	61
III.3.1.1. Carte de contraintes de von Mises et Déplacement total.....	61
III.3.1.2. Carte de déformations équivalentes.....	64
III.3.2. Analyse de fatigue	65
III.3.2.1. Carte de durée de vie en fatigue, distribution des dommages et coefficients de sécurité	65
III.4. Simulations par LAMMPS d'un corps d'implant dentaire a l'échelle atomique	70
III.4.1. Simulation du comportement mécanique avec LAMMPS	70
III.4.1.1. Durée de vie en fatigue (Courbe S-N)	70
III.4.1.2. Caractéristiques de rupture	71
III.4.1.3. Analyse contrainte-déformation	71
Conclusion	73
Resume Graphique.....	74
Références	75
Annexe.....	79

Dédicaces

Je dédie ce mémoire à ma famille bien-aimée, source

inépuisable de force et d'amour.

À la mémoire de mon père, qui nous a quittés mais dont la

présence reste vivante dans chaque étape de ma vie. Son

courage et ses valeurs m'accompagnent toujours.

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

Remerciements

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

Je remercie également l'ensemble du corps professoral de université Badji Mokhtar -ANNABA- pour la qualité de leur enseignement qui a nourri ma réflexion et enrichi mes connaissances.

Un grand merci à ma famille et à mes amis pour leur soutien inconditionnel, leur patience et leur encouragement 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 les implants de hanche, deux géométries (avec et sans trous) et deux matériaux (Ti-6Al-4V et alliages Co-Cr) ont été étudiés. 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, particulièrement dans les conceptions intégrant des trous, augmentant le facteur de sécurité de 20 %. Cet alliage démontre également une résistance exceptionnelle à la fatigue, atteignant $1,2 \times 10^7$ 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. Les déformations, restant dans le domaine élastique, confirment l'absence de déformation permanente.

Pour les implants dentaires, deux variantes géométriques (avec et sans goujure) et 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 (5×10^6 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 maillage. La courbe contrainte-déformation, dérivée d'une déformation totale de 1 % (réduction de 50 \AA à 49,5 \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 \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

Abstract.

This study employs a multi-scale biomechanical approach to optimize the performance of hip and dental implants, integrating macroscopic analyses conducted with ANSYS 18.1 and atomic-scale simulations performed using LAMMPS, visualized via VMD. For hip implants, two geometries (with and without holes) and two materials (Ti-6Al-4V and Co-Cr alloys) were investigated. Macroscopic results demonstrate that the Ti-6Al-4V alloy, due to its ductility, ensures a uniform distribution of von Mises stresses (600 MPa under 3000 N) at the femoral stem, particularly in designs incorporating holes, which increase the safety factor by 20%. This alloy also exhibits exceptional fatigue resistance, achieving 1.2×10^7 cycles, with critical zones located at the femoral stem interface. In contrast, Co-Cr alloys, with higher rigidity (230 GPa), generate stress peaks (650 MPa) in the femoral head, increasing the risk of failure under high loads. Deformations remain within the elastic range, confirming the absence of permanent deformation.

For dental implants, two geometric variants (with and without grooves) and 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 evenly distributed in the root screw, minimizing fracture risks due to its ductility. Zirconia, however, exhibits stress peaks (700 MPa) in the crown, suggesting an increased risk of microcracks due to its brittle nature. In fatigue, Ti-6Al-4V achieves 10^7 cycles, outperforming zirconia (5×10^6 cycles).

At the atomic scale, modeling of the hexagonal close-packed (HCP) structure of Ti-6Al-4V (90% Ti, 6% Al, 4% V) reveals crystalline defects (edge, screw, and mixed dislocations, extrinsic and intrinsic stacking faults, vacancies, and interstitials) influencing mechanical deformation. The radial distribution function (RDF) and local stress calculations, obtained via LAMMPS, show stress concentration in the compression region ($x \geq 48 \text{ \AA}$) with a linear deformation 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 deformation of 1% (reduction from 50 \AA to 49.5 \AA), enables the evaluation of key mechanical properties, such as Young's modulus and yield strength. The root mean square deviation (RMSD), ranging from 10 to 15 \AA , reflects significant structural perturbations due to crystalline 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 with holes or grooves optimize stress distribution, reducing failure risks. These findings pave the way for experimental validation and advanced optimization of implant geometries and materials to enhance long-term durability and performance in biomedical applications.

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

الملخص

تعتمد هذه الدراسة نهجاً بيوميكانيكياً متعدد المقاييس لتحسين أداء الغرسات الوركية والسنوية، من خلال دمج التحليلات الكلية باستخدام برنامج ANSYS 18.1 والمحاكاة على المستوى الذري باستخدام LAMMPS ، مع التصور البصري

عبر VMD بالنسبة للغرسات الوركية، تمت دراسة تصميمين هندسيين (مع ثقوب وبدون ثقوب) ومادتين سبيكة Ti-6Al-4V وسبائك Co-Cr). تُظهر النتائج الكلية أن سبيكة Ti-6Al-4V ، بفضل ليونتها، تضمن توزيعاً متجانساً لإجهادات فون ميزس (600 ميغاباسكال تحت حمل 3000 نيوتن) عند جذع الفخذ، خاصة في التصميم التي تحتوي على ثقوب، مما يزيد معامل الأمان بنسبة 20%. كما تُظهر هذه السبيكة مقاومة استثنائية للتعب، حيث تصل إلى 1.2×10 دورة، مع وجود مناطق حرجة عند واجهة جذع الفخذ. في المقابل، تُولد سبائك Co-Cr ، ذات الصلاحة العالية (230 جيغاباسكال)، ذروات إجهاد (650 ميغاباسكال) في رأس الفخذ، مما يزيد من مخاطر الفشل تحت الأحمال العالية. تظل التشوّهات ضمن النطاق المرن، مما يؤكّد غياب التشوّه الدائم.

بالنسبة للغرسات السنية، تم تحليل نوعين هندسيين (مع أخدود وبدون أخدود) ومادتين V (Ti-6Al-4V) والزركونيا، ZrO_2 . تُشير محاكاة ANSYS إلى أن Ti-6Al-4V تتحمل بفعالية أحمال المضغ (1000 نيوتن)، مع إجهادات قصوى تبلغ 500 ميغاباسكال موزعة بشكل متساوٍ في المسمار الجذري، مما يقلل من مخاطر الكسر بفضل ليونتها. في المقابل، تُظهر الزركونيا ذروات إجهاد (700 ميغاباسكال) في الناج، مما يشير إلى مخاطر متزايدة للتشقّقات الدقيقة بسبب طبيعتها الهشة. في اختبارات التعب، يصل Ti-6Al-4V إلى 10 دورات، متفوّقاً على الزركونيا (5×10 دورات).

على المستوى الذري، كشف نمذجة الهيكل البلوري سداسي التراص المحكم (HCP) لسبيكة Ti-6Al-4V 90% تيتانيوم، 6% المنيوم، 4% فاناديوم) عن عيوب بلورية (انخلاعات من نوع الحافة، اللولبية، والمحشطة، وأخطاء تراص خارجية وداخلية، وفراغات وشوائب بينية) تؤثّر على التشوّه الميكانيكي. تُظهر دالة التوزيع الشعاعي (RDF) وحسابات الإجهاد المحلي، المستخلصة عبر LAMMPS ، تركيز الإجهادات في منطقة الضغط $48 \geq x$ (أنغستروم) مع تدرج تشوّه خطى. تمت ملاحظة الانتقال المرن-اللدن عند 600 ميغاباسكال، مدوماً باليات انزلاق الانخلاعات والتوامة. سمحت منحني الإجهاد-التشوّه، المستمد من تشوّه إجمالي بنسبة 1% (انخفاض من 50 أنغستروم إلى 49.5 أنغستروم)، بتقدير الخصائص الميكانيكية الأساسية مثل معامل يونغ وحد الخصوب. يعكس الجذر التربيعي للانحراف المتوسط (RMSD) ، الذي يتراوح بين 10 و 15 أنغستروم، اضطرابات هيكلية كبيرة ناتجة عن العيوب البلورية وظروف الضغط الشديدة.

تُبرز هذه الدراسة تفوق Ti-6Al-4V في التطبيقات البيو-طبية الصعبة بفضل مثانته، ليونتها، ومقاومته للتعب. تُحسن التصميم ذات الثقوب أو الأخدود توزيع الإجهادات، مما يقلل من مخاطر الفشل. تفتح هذه النتائج المجال للتحقق التجريبي والتحسين المتقدم للهندسات والمواد لتعزيز المثانة والأداء طويلاً للغرسات البيو-طبية.

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

Introduction générale

Les implants orthopédiques et dentaires jouent un rôle fondamental dans la restauration de la fonction articulaire et masticatoire, améliorant significativement la qualité de vie des patients atteints de pathologies dégénératives, de traumatismes ou de pertes tissulaires [1]. En orthopédie, les implants de hanche sont utilisés pour traiter des affections telles que l'arthrose ou les fractures fémorales, tandis qu'en odontologie, les implants dentaires constituent une solution durable face à la perte dentaire, en remplacement des prothèses amovibles traditionnelles [2].

Ces dispositifs doivent satisfaire à des exigences biomécaniques rigoureuses : résistance aux charges dynamiques et masticatoires, durabilité sous sollicitations cycliques, stabilité mécanique, et intégration osseuse optimale [3]. Leur performance dépend étroitement de deux facteurs clés : le choix des matériaux et la conception géométrique [4]. Dans ce contexte, une attention particulière est portée à l'influence de la géométrie de l'implant sur la distribution des contraintes et la durabilité : pour l'implant de hanche, deux formes sont étudiées — avec trous et sans trous ; pour l'implant dentaire, deux configurations sont également comparées — avec entaille coupante et sans entaille [5].

Ce mémoire propose une démarche d'analyse multi-échelle, combinant la simulation par éléments finis (ANSYS 18.1) à l'échelle macroscopique, et la dynamique moléculaire (LAMMPS) à l'échelle atomique. Cette approche permet de relier les propriétés mécaniques fondamentales des matériaux à la performance globale des implants soumis à des conditions physiologiques réalistes .

Deux études distinctes sont menées :

Pour les implants de hanche, seuls deux matériaux sont considérés : Ti-6Al-4V, un alliage biocompatible et ductile, et les alliages Co-Cr, réputés pour leur rigidité et leur résistance à l'usure. Les analyses s'appliquent à deux variantes géométriques (avec et sans trous) et portent sur les contraintes, et la résistance à la fatigue des éléments critiques (tige et tête fémorale). Les simulations atomistiques permettent d'identifier les mécanismes de déformation propres à chaque matériau (plasticité par dislocations pour le Ti-6Al-4V de structure HCP, rigidité accrue pour les Co-Cr à structure FCC).

Pour les implants dentaires, les matériaux étudiés sont le Ti-6Al-4V et la zircone (ZrO_2), une céramique esthétique et rigide. Les implants sont soumis à des charges masticatoires simulées (100–1000 N) pour comparer leur comportement en fonction de la présence ou non d'une

INTRODUCTION GENERALE

goujure. Les résultats révèlent un bon comportement ductile du titane pour la vis radiculaire et une rigidité avantageuse, mais une fragilité accrue de la zircone pour la couronne.

Ce mémoire est structuré en trois chapitres principaux. Le premier présente les enjeux biomécaniques, les matériaux et la démarche multi-échelle adoptée. Le deuxième détaille la méthodologie de conception géométrique, de modélisation et de simulation. Le troisième expose les résultats comparatifs et les pistes d'optimisation futures, en lien avec une potentielle validation expérimentale.

En somme, ce travail contribue à l'optimisation des implants orthopédiques et dentaires en explorant l'effet croisé de la géométrie et des propriétés mécaniques des matériaux, selon une méthodologie rigoureuse et interdisciplinaire, à la croisée de la recherche fondamentale et des applications cliniques.

Chapitre 1 : Les implants de hanche et dentaires – 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 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 1.2 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).

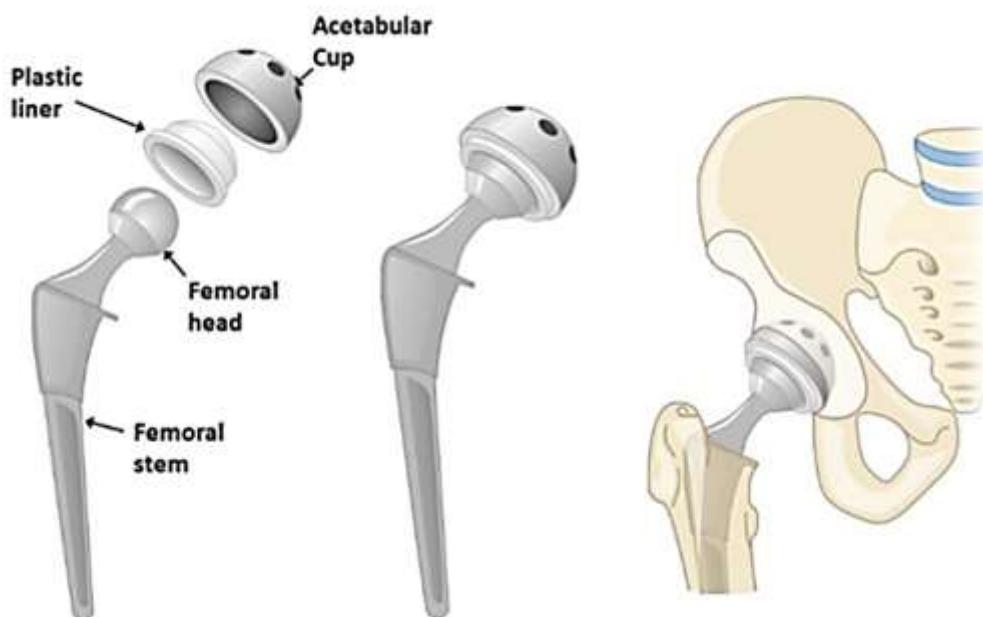


Figure 1 : Description des différentes parties d'une articulation de la hanche (à gauche) et de l'intégration aux os humains (à droite). [11]

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
Propriétés des matériaux (1^{er} niveau)	Composition chimique,	densité,	Module d'élasticité, coefficient de Poisson, limite d'élasticité, résistance à la traction
Propriétés des matériaux (2^{eme} niveau)	Adhésion,	topographie de surface	Module de cisaillement Résistance au cisaillement Modules en flexion Résistance en flexion
Exigences fonctionnelles spécifiques	Biofonctionnalité (non thrombogénique, Adhésion cellulaire, 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
Traitement et fabrication	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 (CoCr) : 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)	≤ 0,08
Phosphore (P)	≤ 0,03
Silicium (Si)	≤ 0,75
Nickel (Ni)	≤ 0,05
Cuivre (Cu)	≤ 0,25
Fer (Fe)	Solde
Manganèse (Mn)	21,00 – 24,00
Soufre (S)	≤ 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 [12].

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

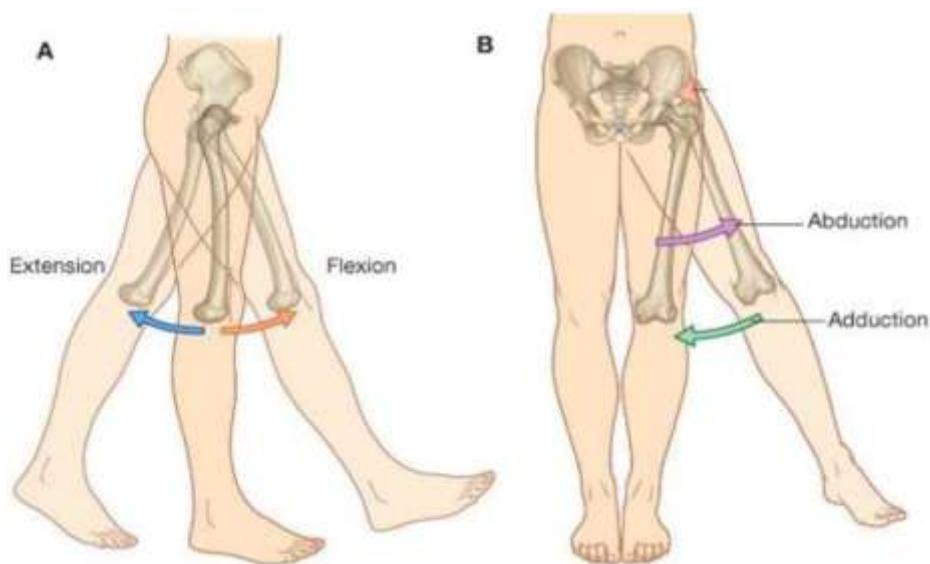


Figure 2 : Mouvements de la hanche [22]

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).

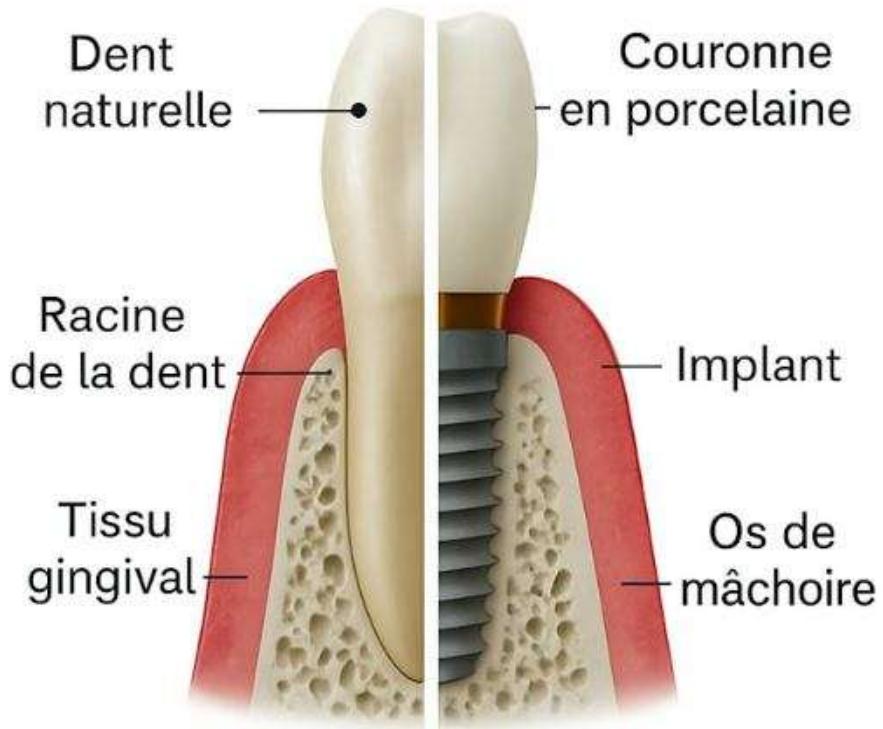


Figure 3 : Dent naturelle vs implant dentaire [26]

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 environnantes. 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 (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, 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 (ZrO_2)	90 – 95 %
Oxyde d'yttrium (Y_2O_3)	3 – 5 %
Oxyde d'aluminium (Al_2O_3)	$\leq 0,5$ %
Oxyde d'hafnium (HfO_2)	≤ 2 %
Autres oxydes (SiO_2 , 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 ($>100 \mu\text{m}$), 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° 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.

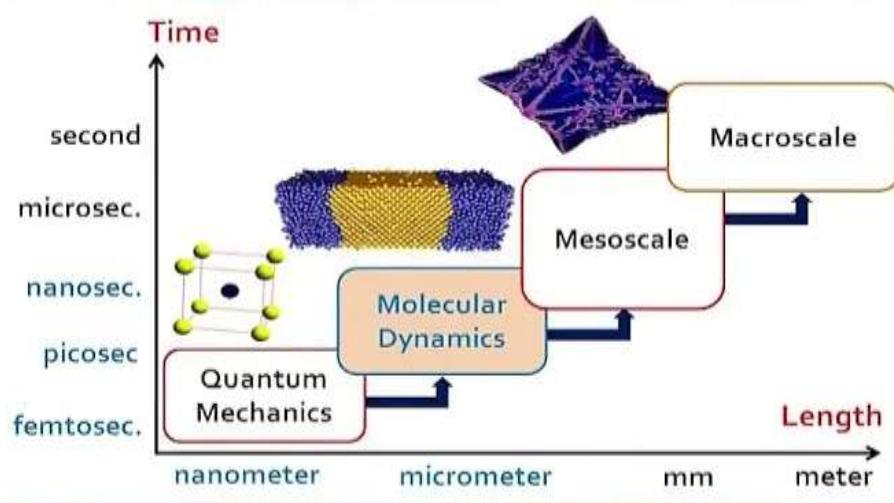


Figure 7 : Simulations : Echelles de temps et de longueur [39].

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 :

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

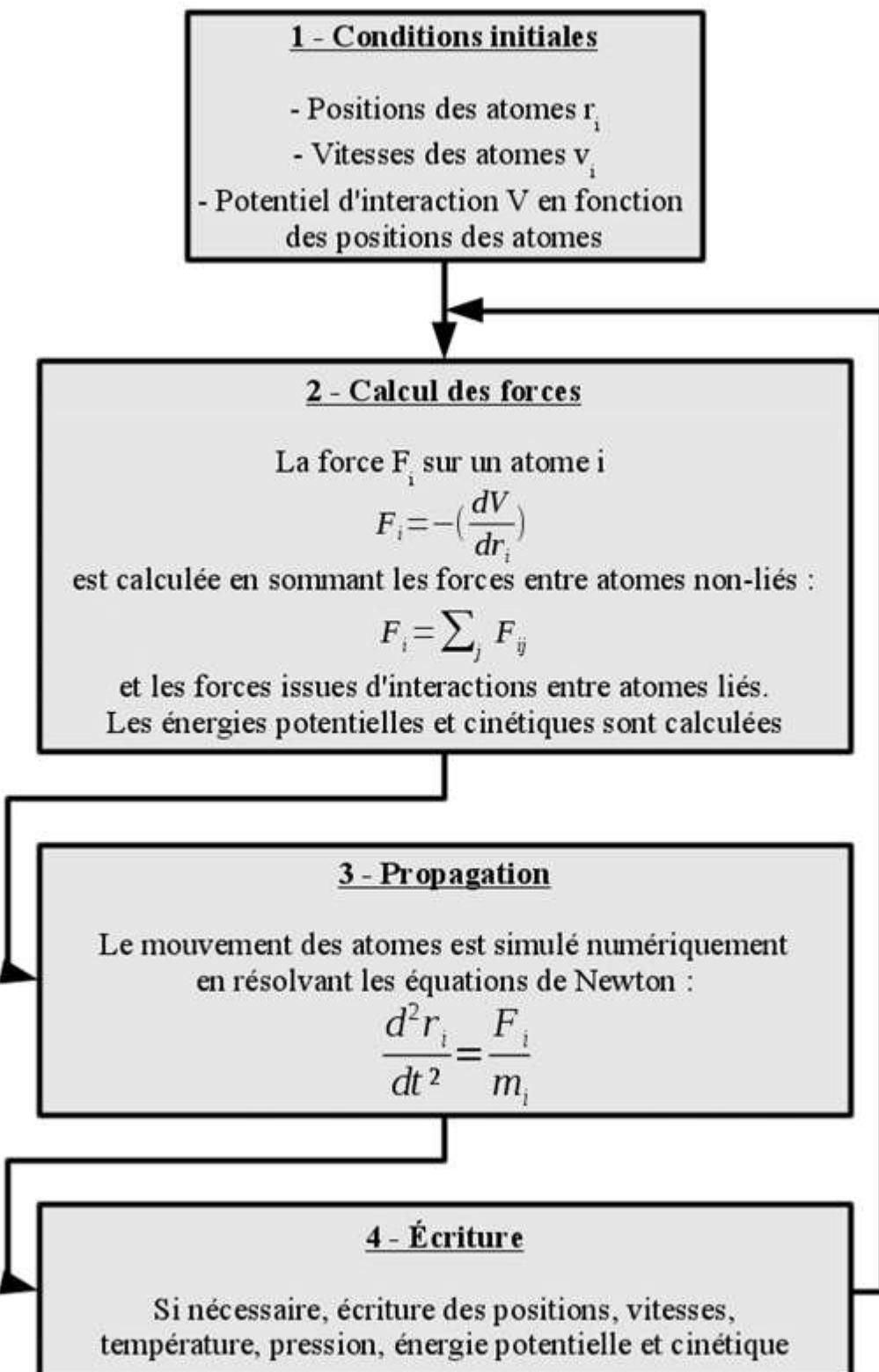
Où m_i est la masse de l'atome (i), r_i sa position, F_i la force exercée, et (U) le potentiel d'interaction (par exemple, potentiel EAM pour les métaux ou Lennard-Jones pour les interactions non liées) [41]. Les simulations MD calculent les trajectoires des atomes sur des échelles de temps de l'ordre 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].

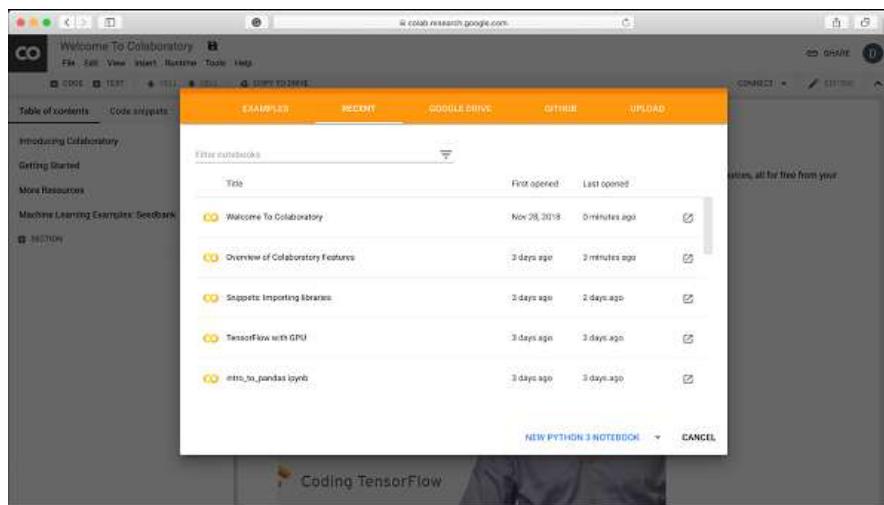


Figure 10 : Interface de LAMMPS sur Google Colab

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 [44]. 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 structurelles induites par la contrainte appliquée. Cela inclut l'identification des défauts cristallins et des changements dans l'organisation atomique [45].

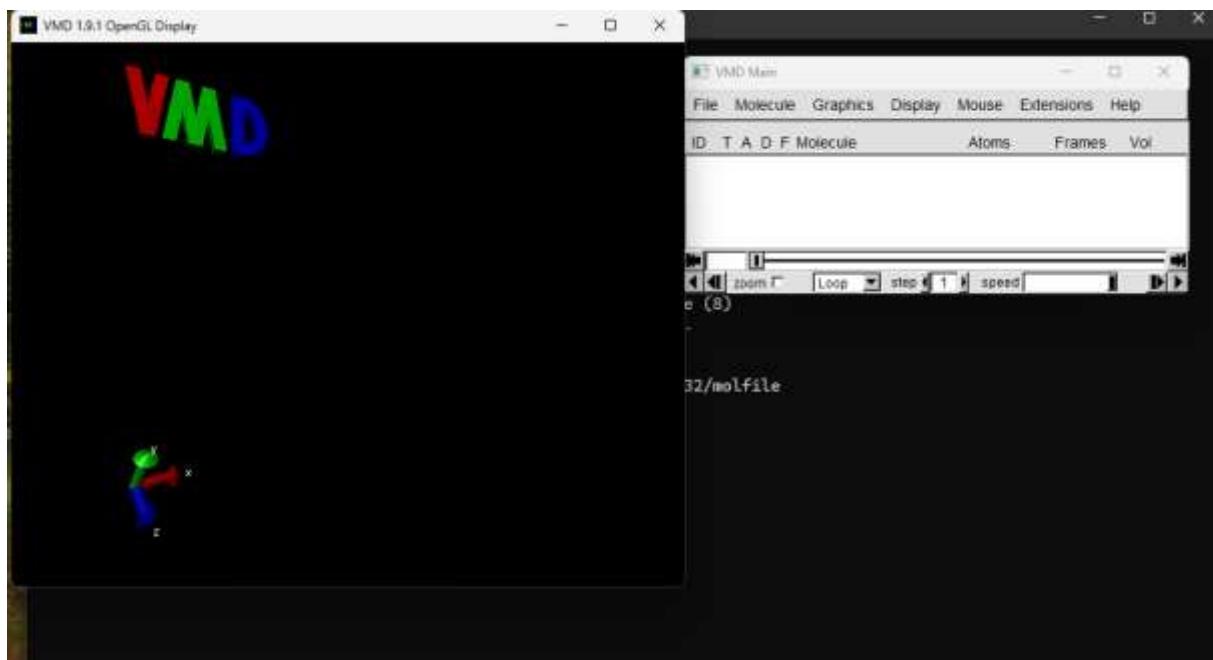


Figure 11 : Interface du logiciel VMD pour la visualisation de la dynamique moléculaire

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.

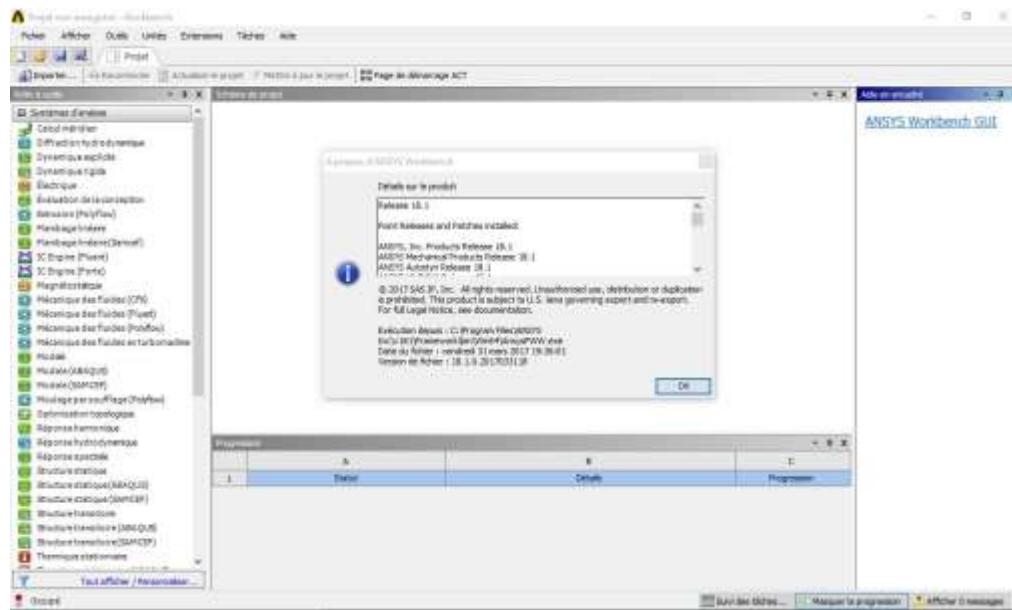


Figure 12 : Interface du logiciel Ansys version 18.1

I.3.2.1. Concepts de base

La FEA repose sur la discréttisation 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 σ 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 σ_1 , σ_2 , σ_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 μm [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

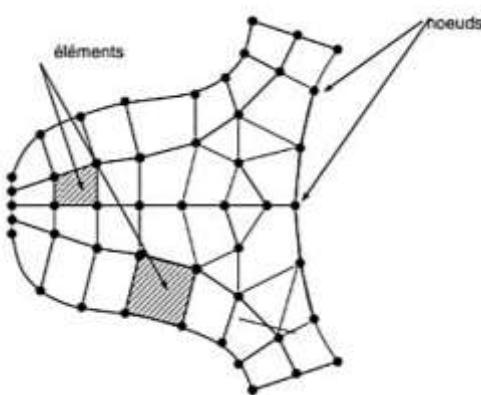


Figure 13 : Discréétisation d'une structure en noeuds et éléments [49].

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.

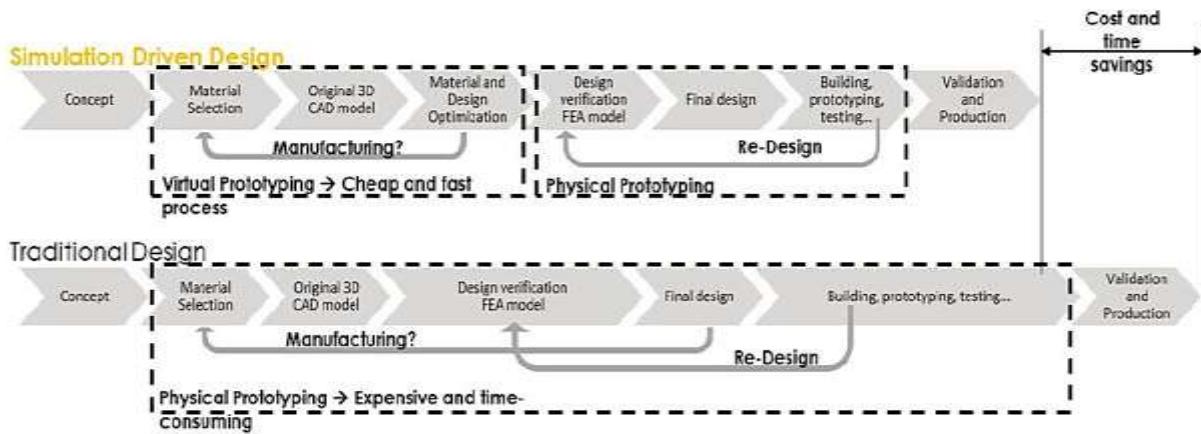


Figure 14 : Organigrammes de l'optimisation des matériaux et de la conception dans le cas de la conception pilotée par la simulation (en haut) et de la conception traditionnelle (en bas) [11].

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 : Modélisation et simulation multi-échelle des implants de hanche et dentaires avec ANSYS et LAMMPS

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.

Pour les implants de hanche, l'analyse porte exclusivement sur deux matériaux couramment utilisés en chirurgie orthopédique : l'alliage de titane Ti-6Al-4V, reconnu pour sa biocompatibilité et sa ductilité, et les alliages Co-Cr (Cobalt-Chrome), appréciés pour leur rigidité et leur résistance à l'usure. Deux configurations géométriques sont étudiées : avec trous et sans trous, afin d'évaluer l'influence de ces variations sur la répartition des contraintes, la résistance à la fatigue et la stabilité globale de l'implant.

En parallèle, pour les implants dentaires, l'étude s'intéresse à deux matériaux : le Ti-6Al-4V et la zircone (ZrO_2), une céramique rigide et esthétique. La conception géométrique est également analysée selon deux variantes : avec goujure et sans goujure, dans le but d'étudier leur impact sur le comportement mécanique de la vis radiculaire et de la couronne sous des charges masticatoires simulées.

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 (stresses) et des déformations (strains) 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 discrétré en éléments finis pour permettre une analyse précise.

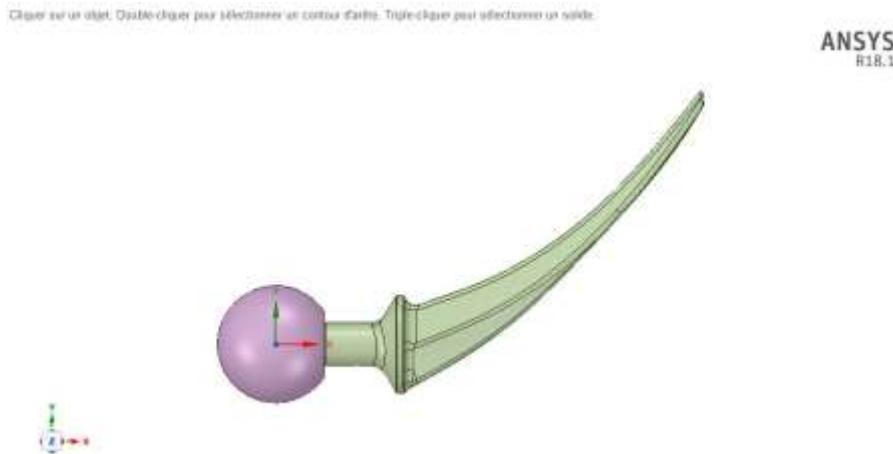


Figure 1 : Un modèle tridimensionnel (3D) de l'implant de hanche sans trous

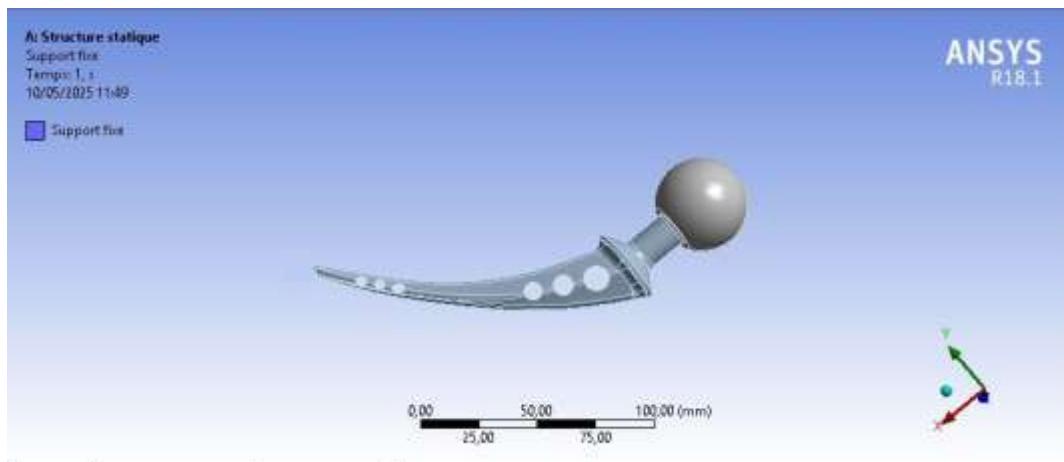


Figure 2 : Un modèle tridimensionnel (3D) de l'implant de hanche avec trous

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 3 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.

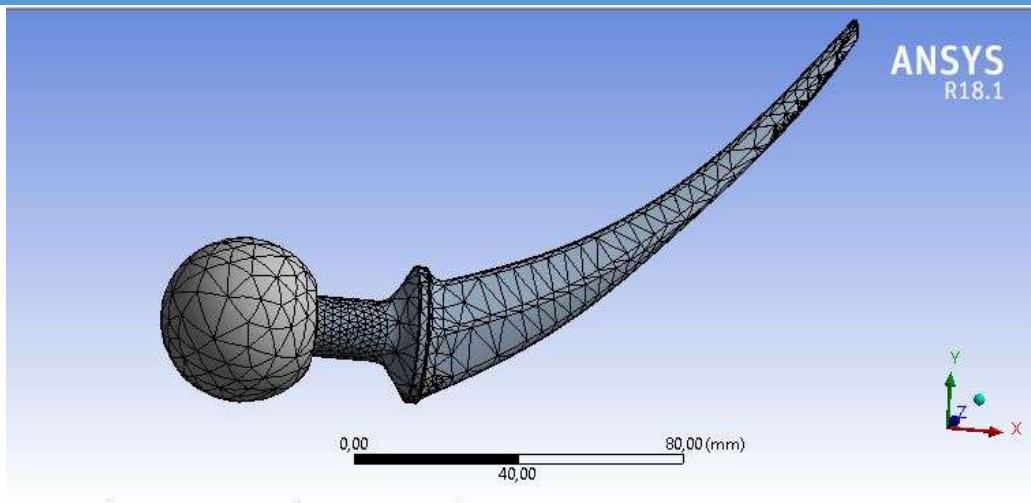


Figure 3 : Mailler la géométrie

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°.

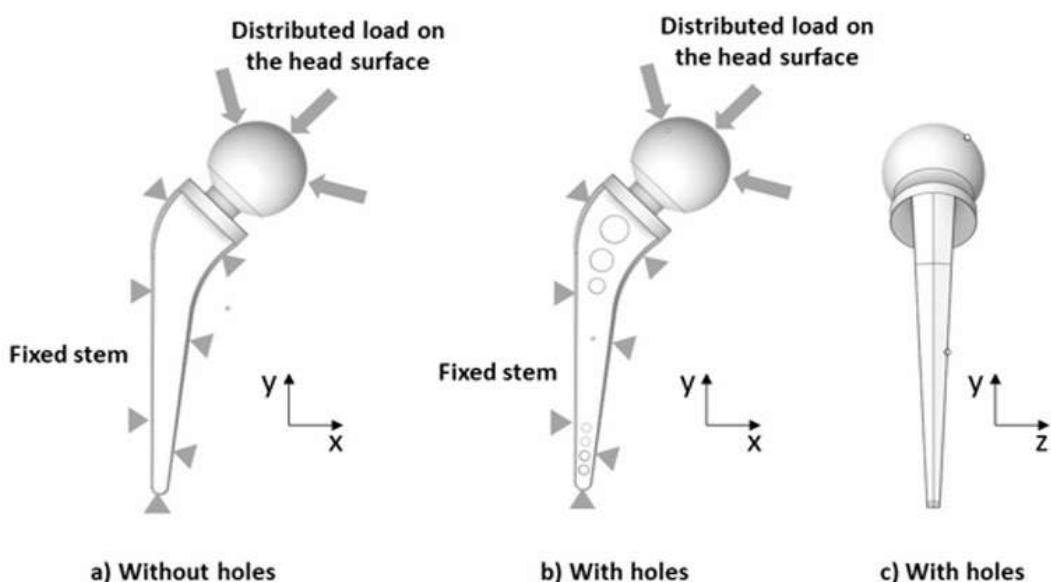


Figure 4 : Illustration des charges et des supports [11].

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.

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

Critères de défaillance : Des critères comme la loi de Goodman ou de Soderberg seront employés pour prédire la durée de vie avant rupture.

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, et alliages Co-Cr) 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 α 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 ($x \geq 48 \text{ \AA}$), tandis que les atomes de la région fixe ($x \leq 2 \text{ \AA}$) ont été maintenus immobiles. Les atomes dans la région mobile ($2 < x < 48 \text{ \AA}$) 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

Objectif

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 discréteisé en éléments finis pour une analyse précise.

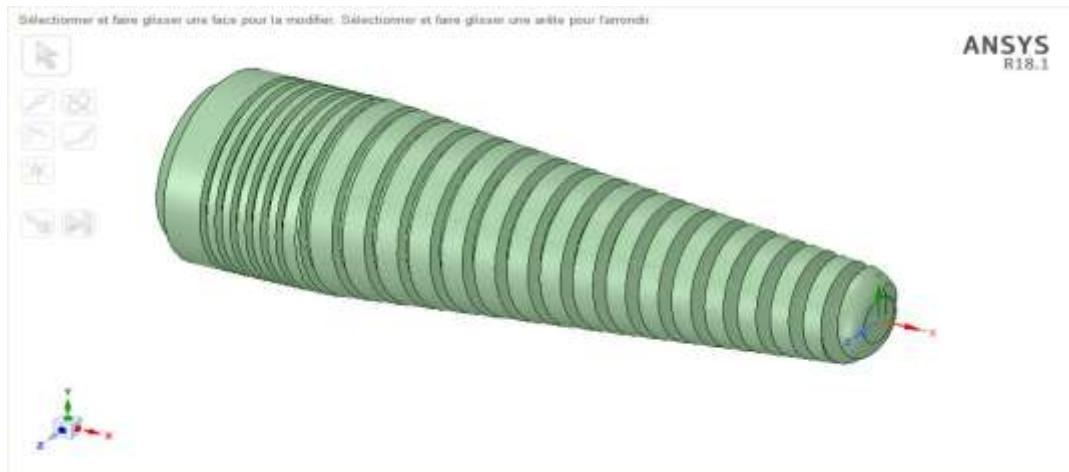


Figure 5 : Modèle tridimensionnel (3D) de l'implant dentaire sans goujure

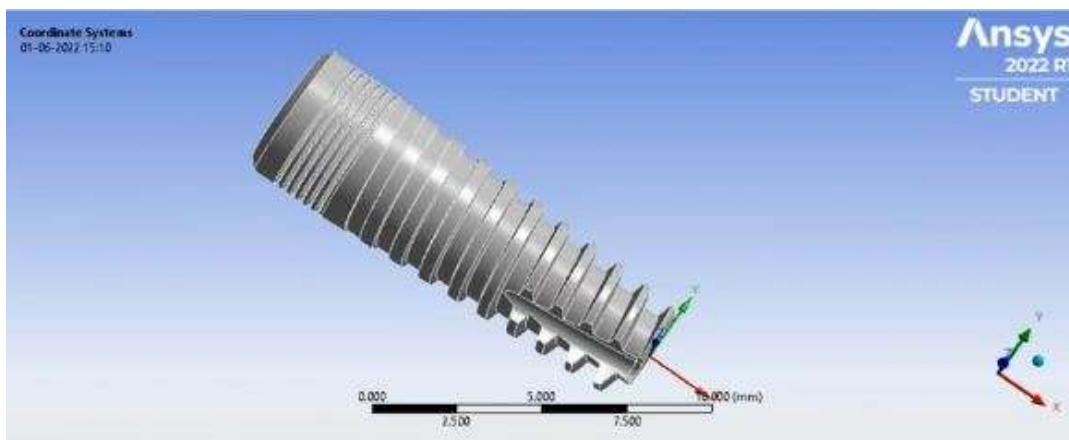


Figure 6 : Modèle tridimensionnel (3D) de l'implant dentaire avec avec goujure

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 800 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.

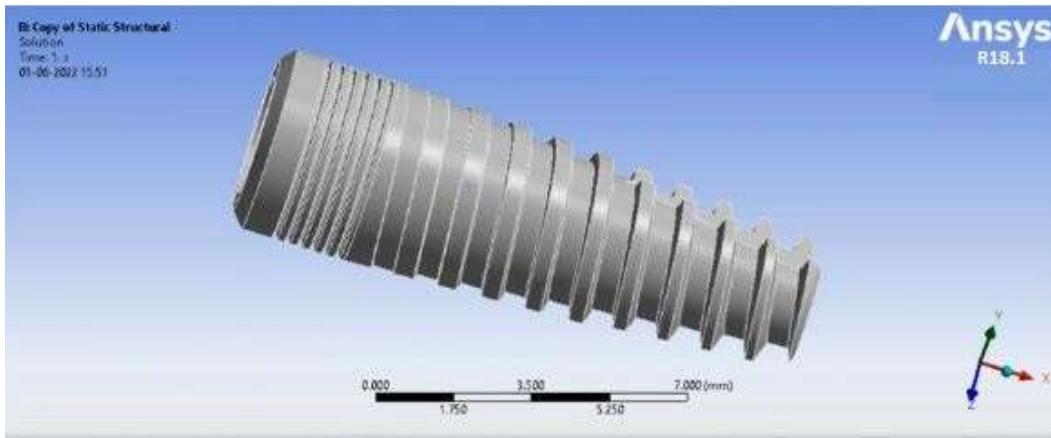


Figure 7 : Illustration des charges et des supports

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.

Changement : Des cycles de chargement simulant la mastication (par exemple, 1 à 2 millions de cycles par an, avec des amplitudes de 100 à 800 N) seront appliqués.

Critères de défaillance : Des critères comme la loi de Goodman pour le Ti-6Al-4V et des modèles spécifiques aux céramiques pour la Zirconia seront employés pour prédire la durée de vie avant rupture.

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.

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 et Co-Cr) 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 Illustre les zones à risque de déformation ou de rupture.

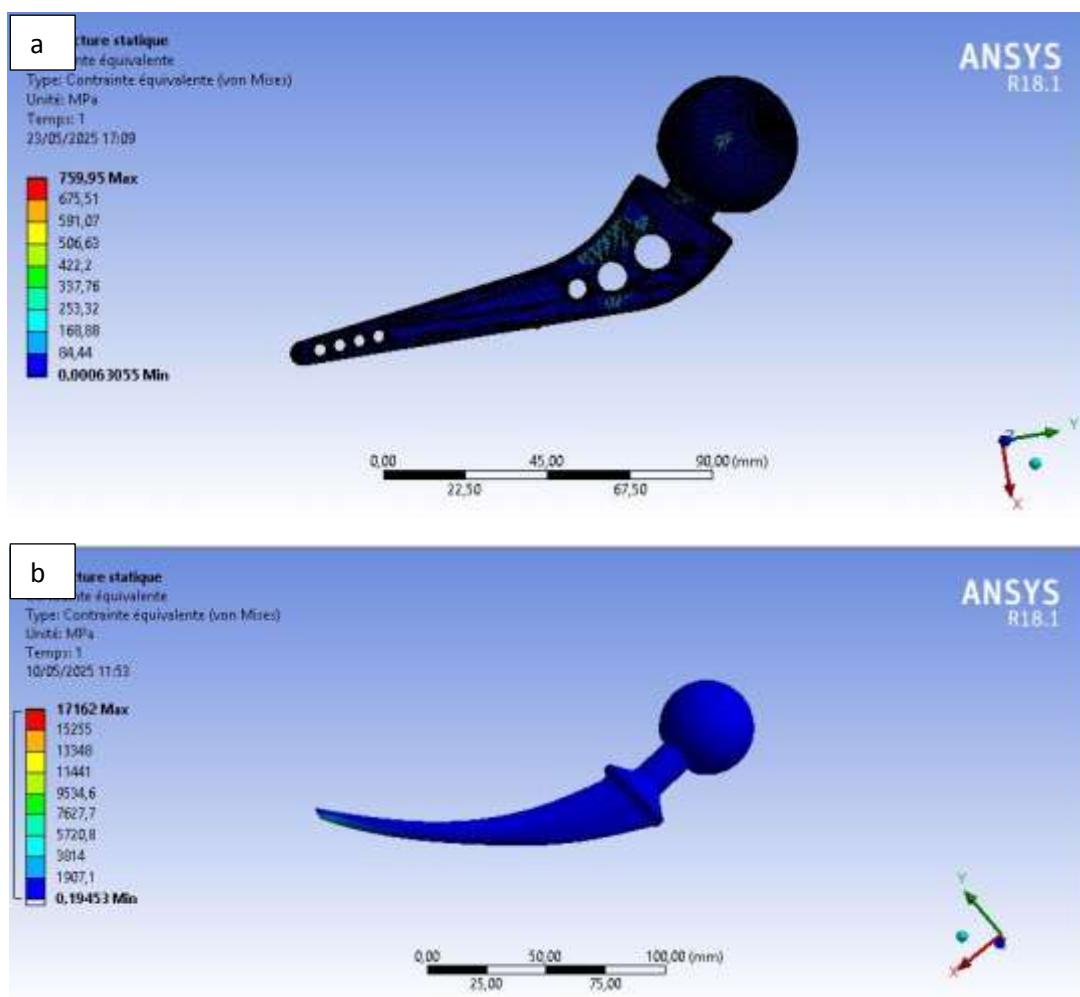


Figure 1 : Distribution des contraintes de von Mises pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.

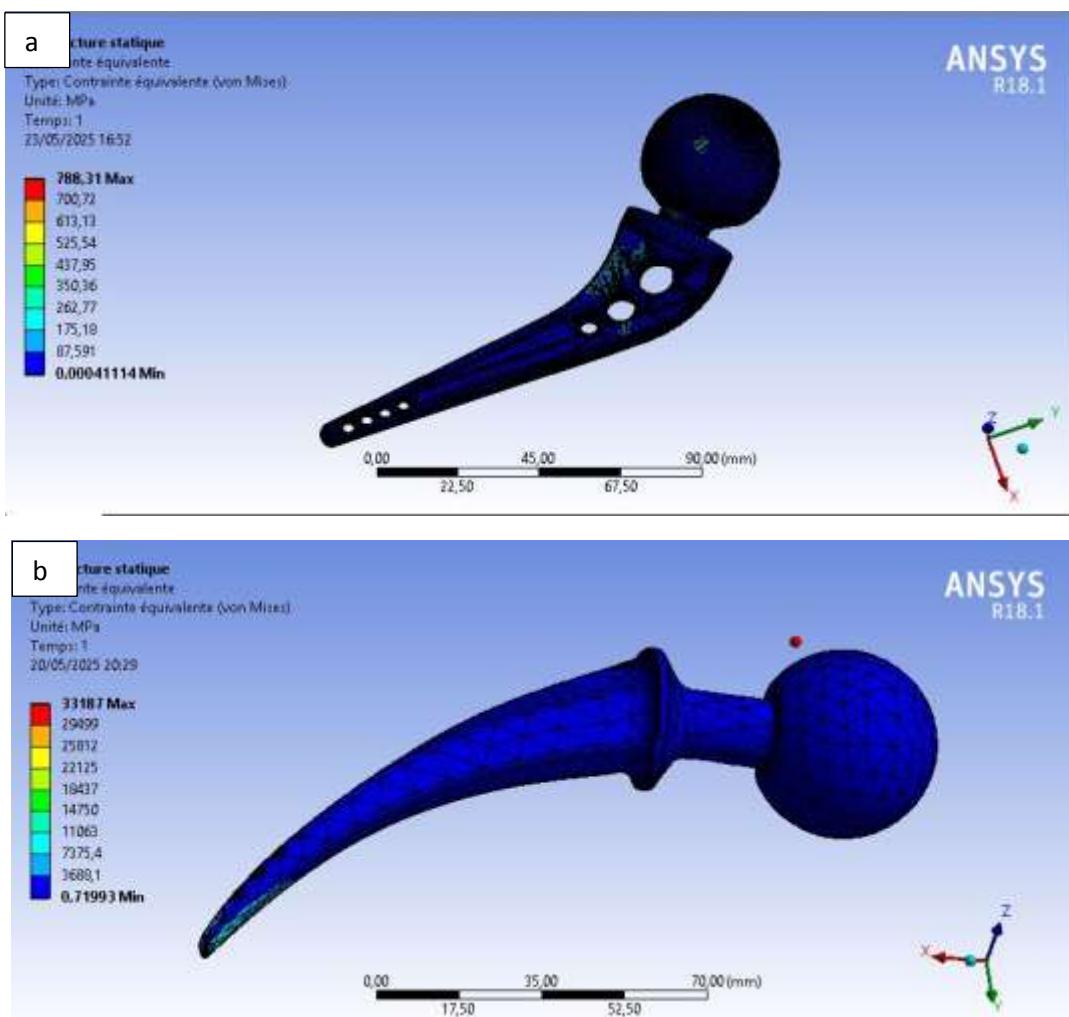
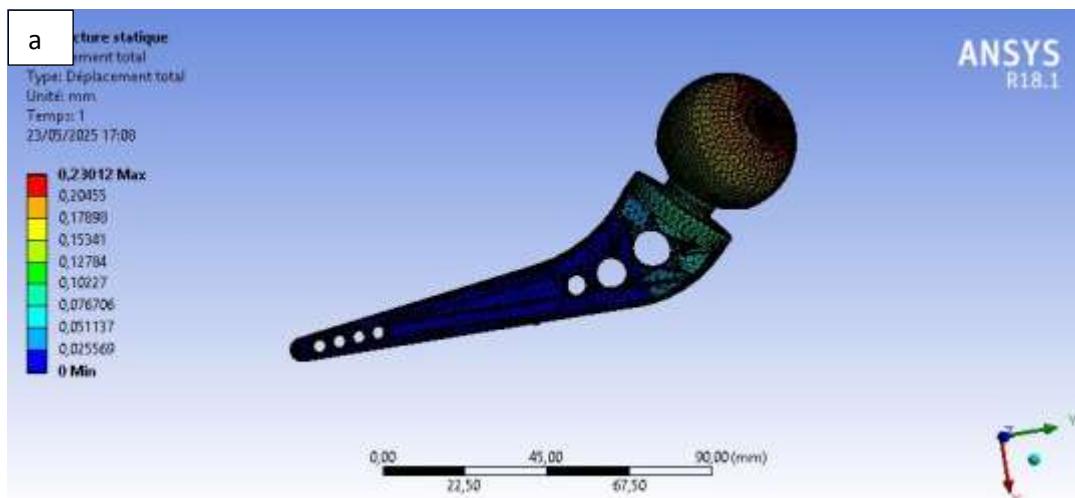


Figure 2 : Distribution des contraintes de von Mises pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour l'alliage Co-Cr.



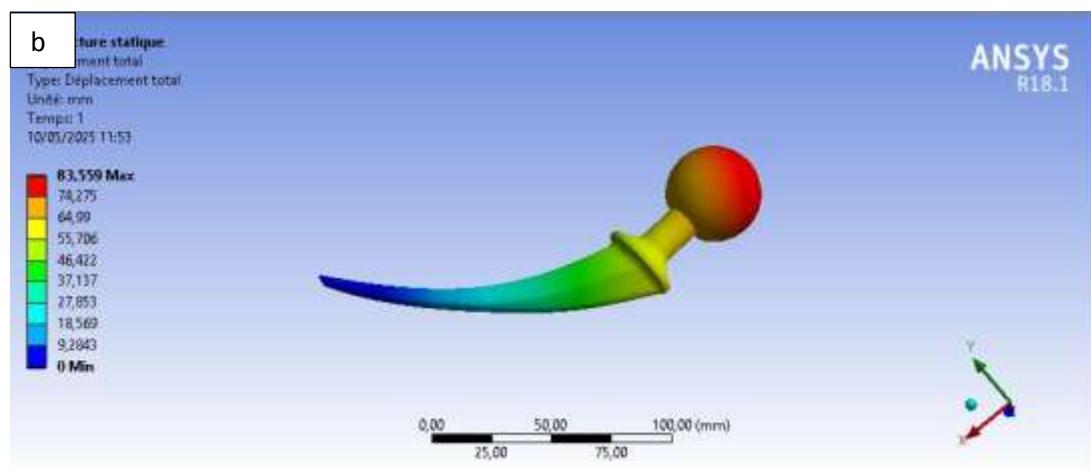


Figure 3 : Distribution des Déplacement total pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.

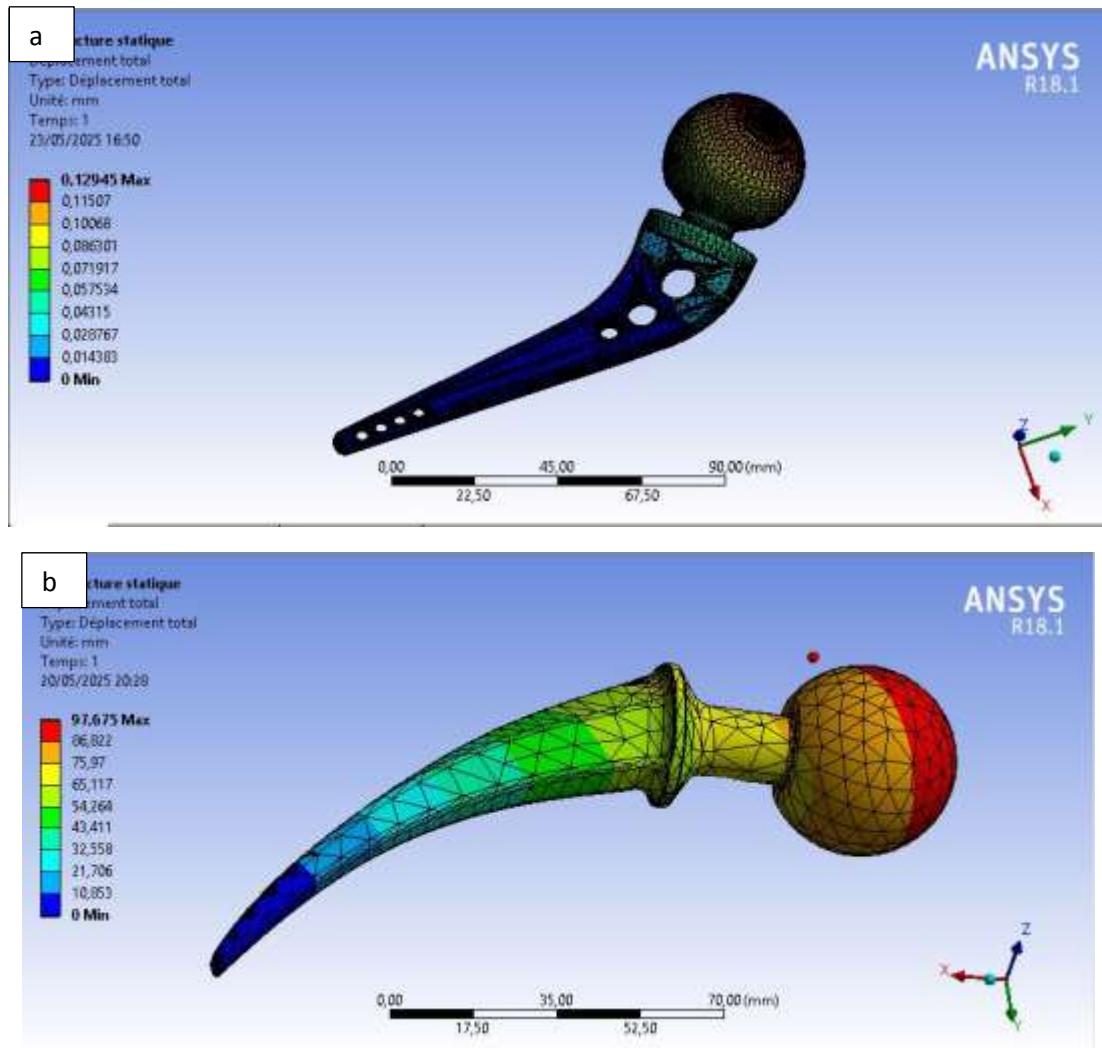


Figure 4 : Distribution des Déplacement total pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour l'alliage Co-Cr.

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.

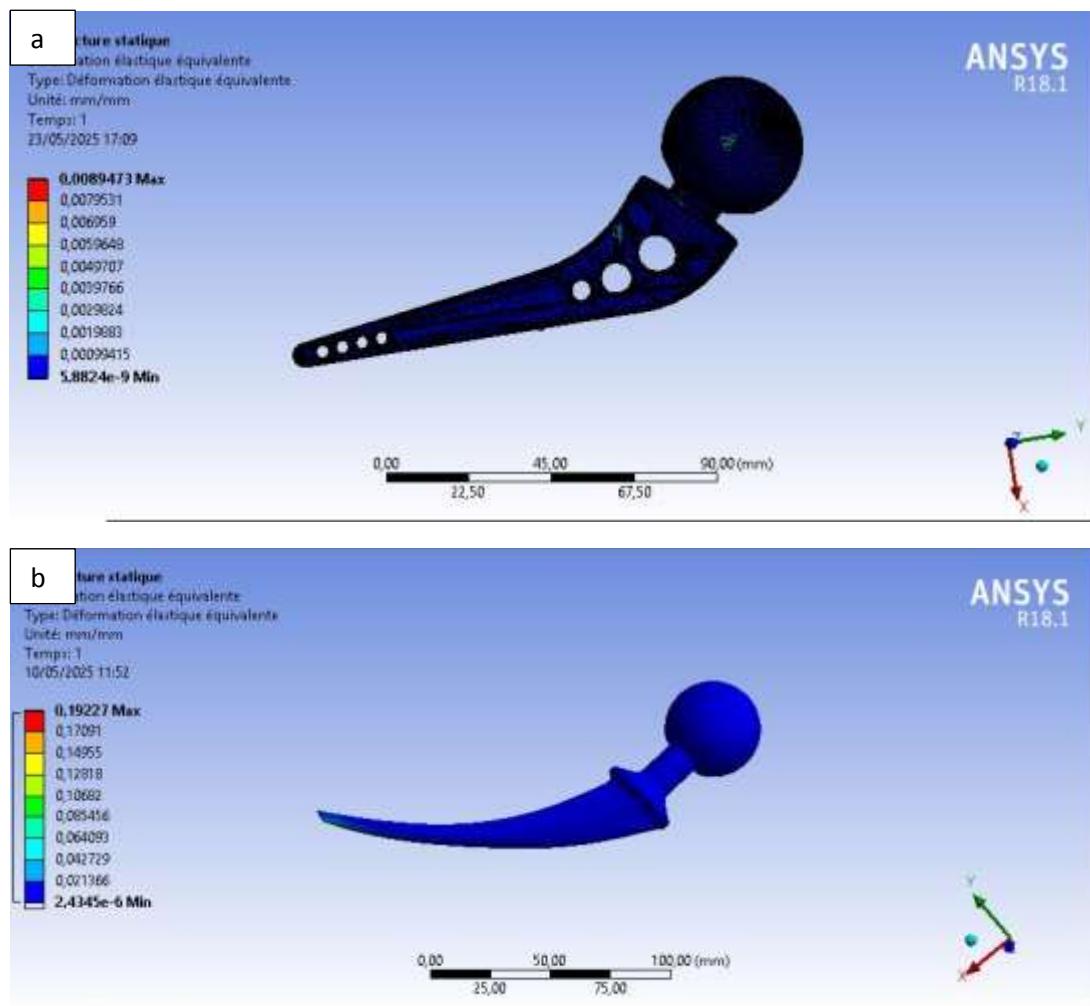
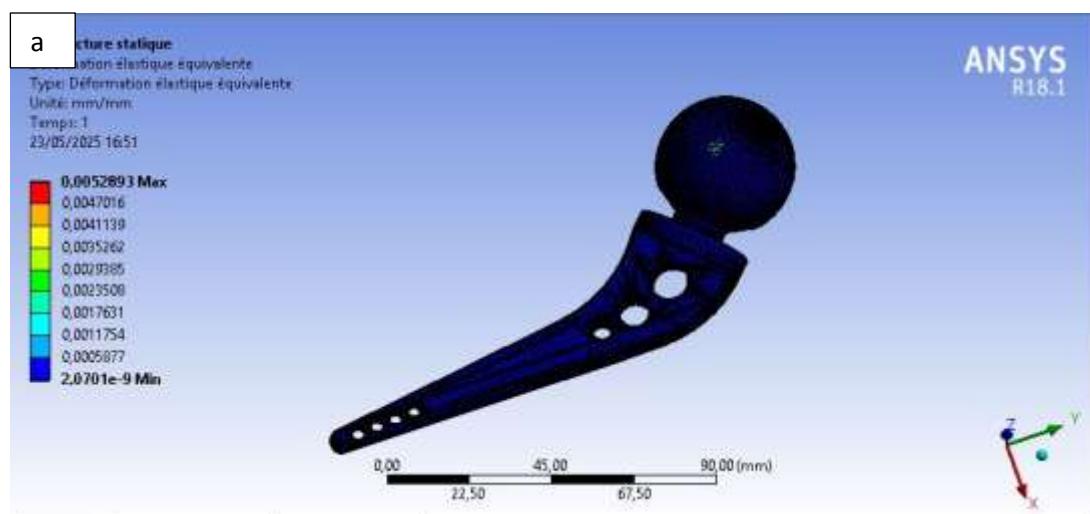


Figure 5 : Distribution des déformations équivalentes pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Ti-6Al-4V.



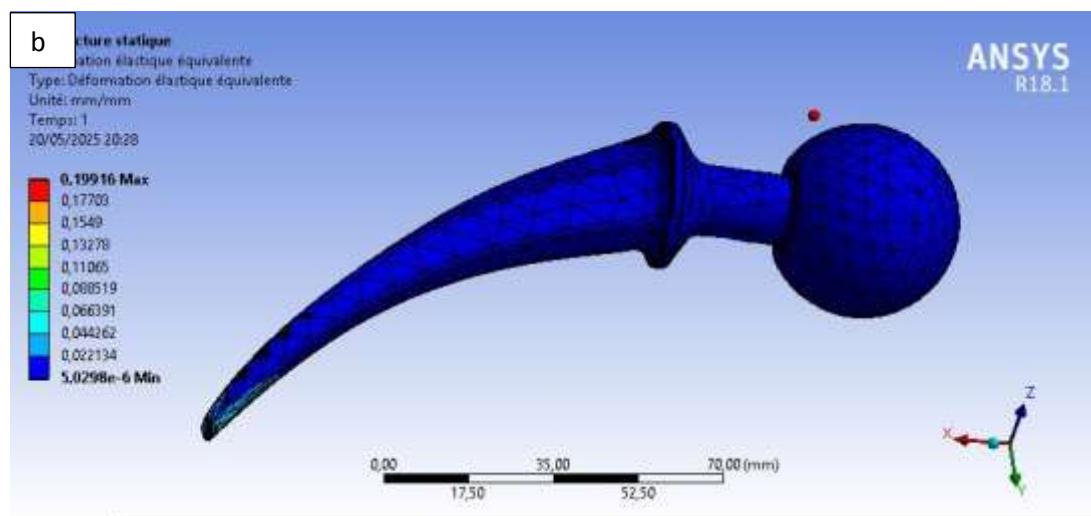


Figure 6 : Distribution des déformations équivalentes pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Co-Cr.

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 [51].

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, distribution des 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).

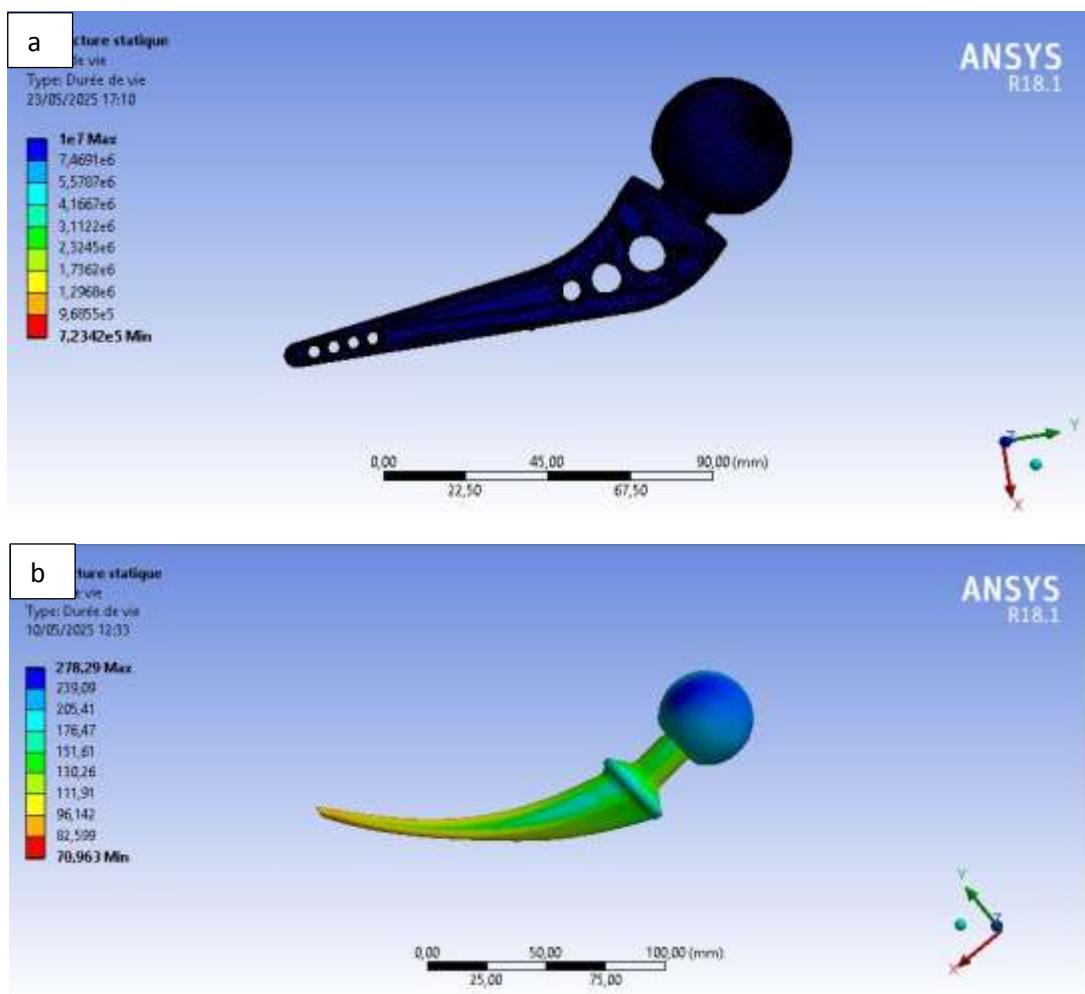
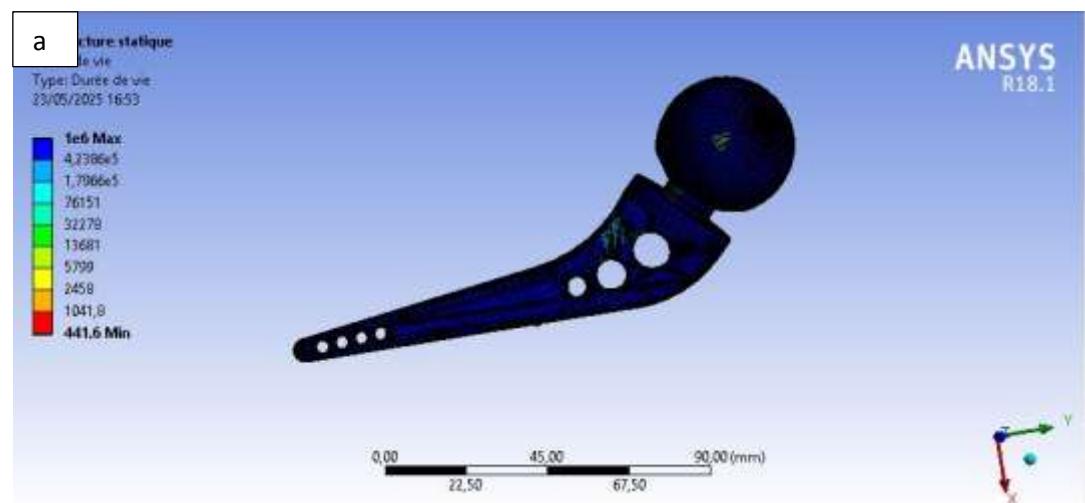


Figure 7 : Carte de durée de vie en fatigue pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Ti-6Al-4V.



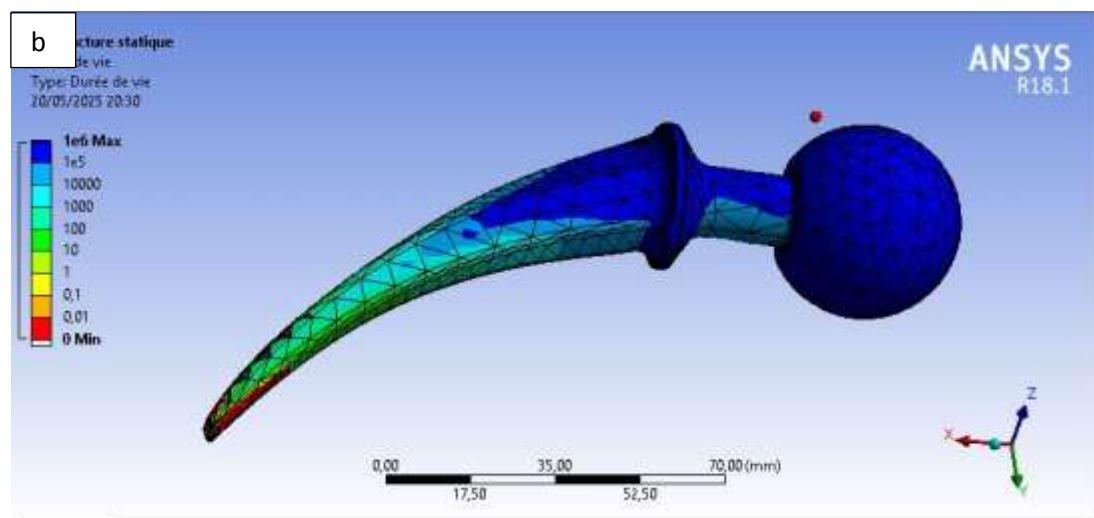


Figure 8 : Carte de durée de vie en fatigue pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Co-Cr.

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.

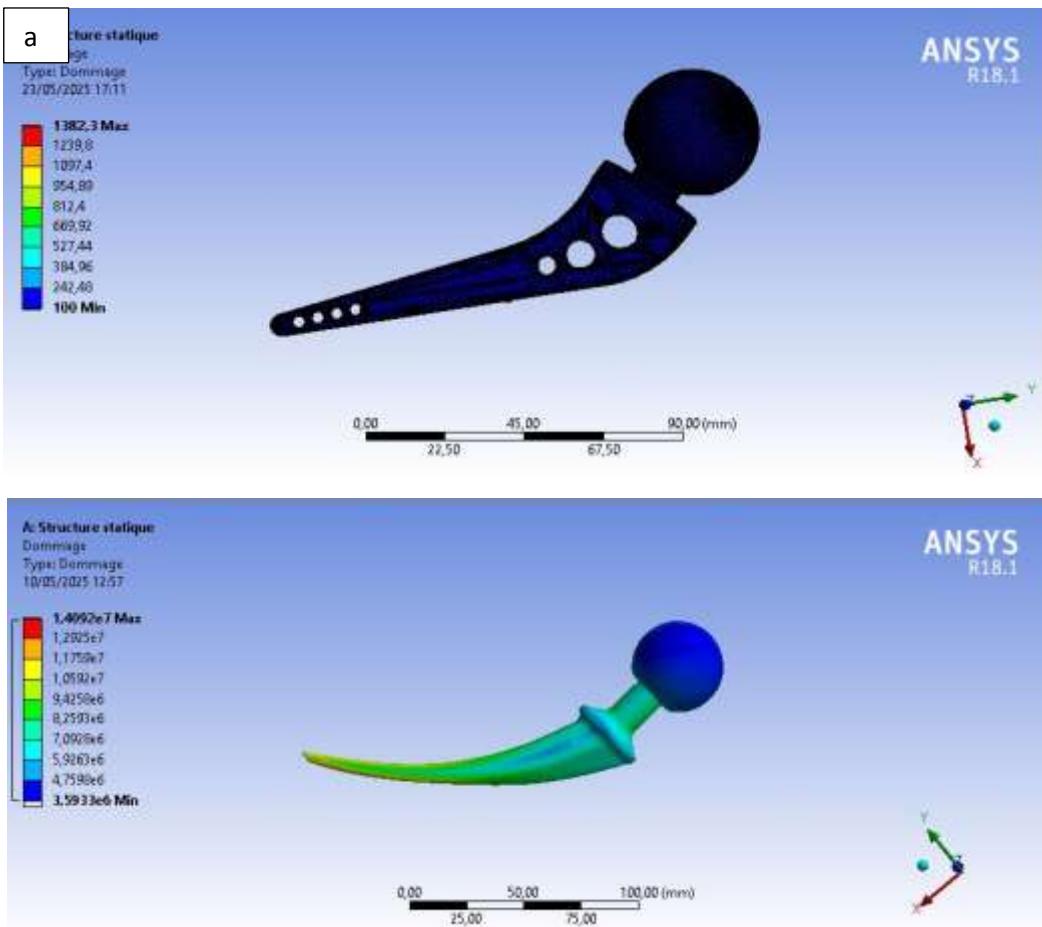


Figure 9 : Distribution des dommages pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Ti-6Al-4V.

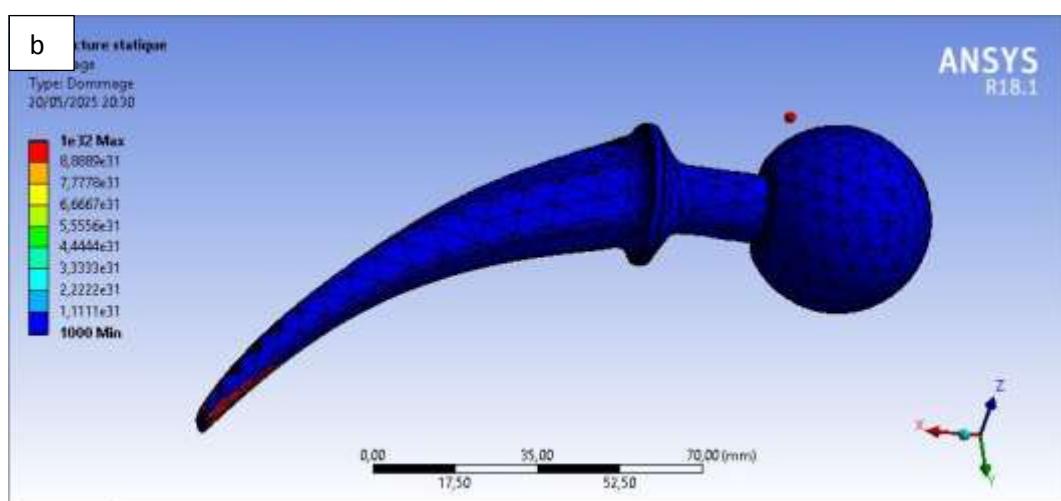
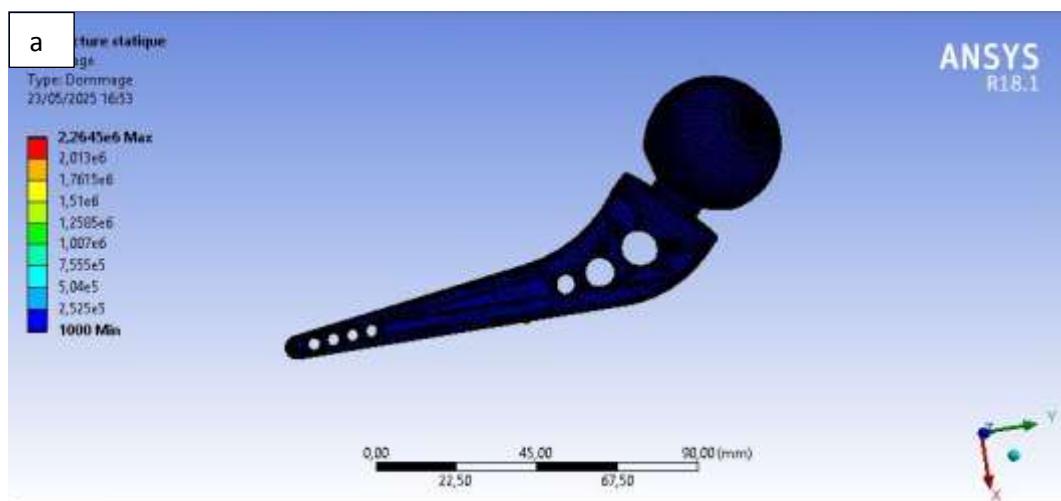
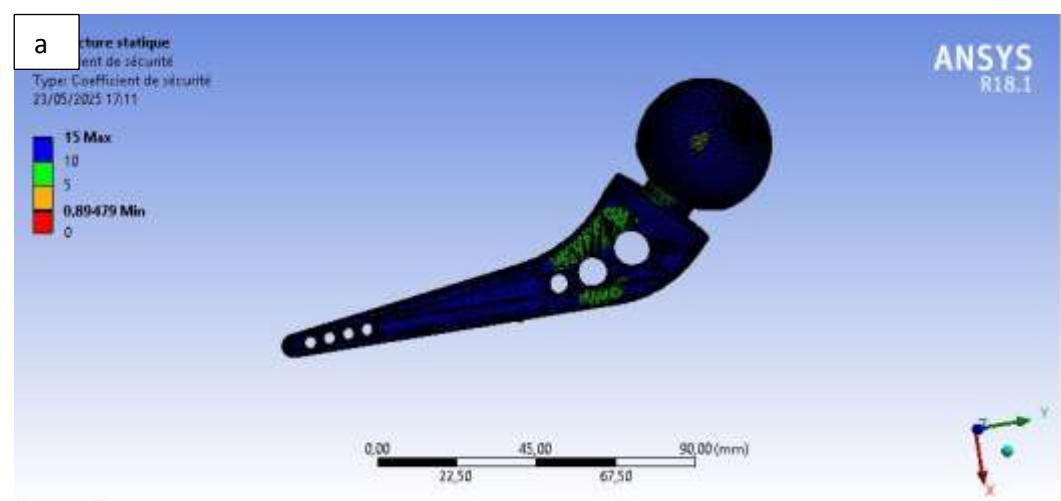


Figure 10 : Distribution des dommages pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Co-Cr.



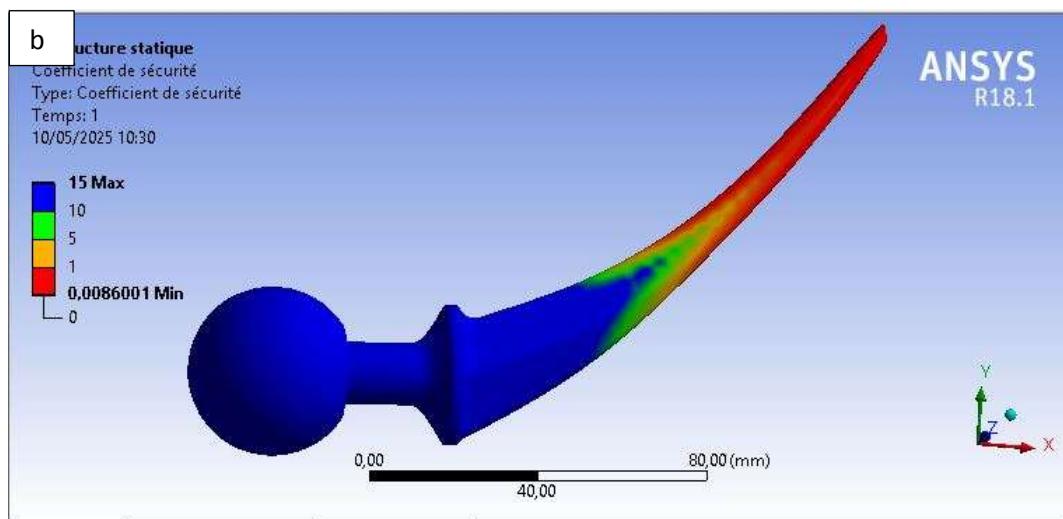


Figure 11 : Distribution des coefficients de sécurité pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Ti-6Al-4V.

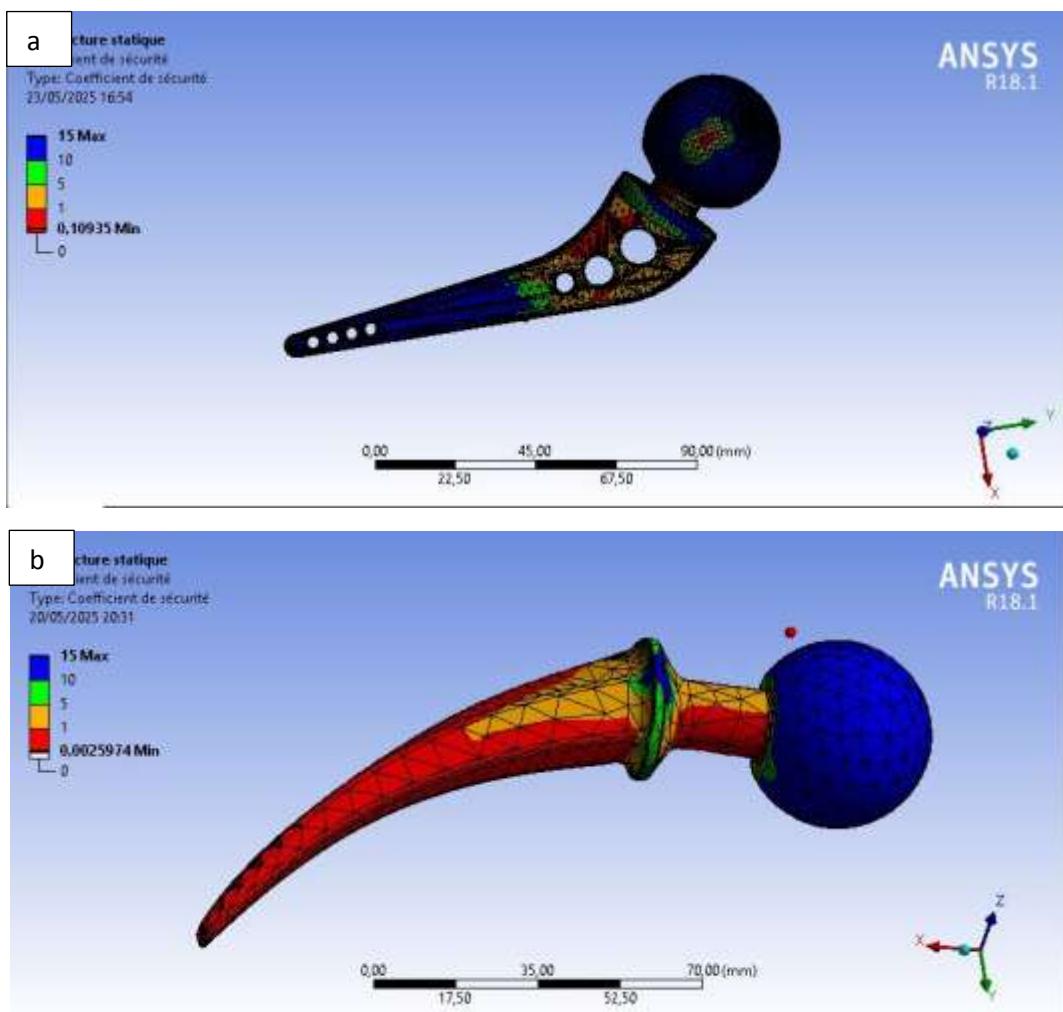


Figure 12 : Distribution des coefficients de sécurité pour un implant de hanche (a) avec et (b) sans trous, sous une charge de 3000 N, pour Co-Cr.

Les résultats indiquent une durée de vie estimée de 10^7 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 [52].

Il est intéressant de noter que l'utilisation du design avec des trous (et en particulier celui fabriqué en Ti-6Al-4V) présente généralement un facteur de sécurité plus élevé par rapport aux autres, avec une augmentation systématique de 20 %. Cet effet pourrait être attribué au fait que le design avec plusieurs trous tend à répartir uniformément les lignes de contrainte sur la géométrie, ce qui entraîne moins de contraintes et une résistance accrue. Sur la base de ce résultat initial, le design avec des trous est utilisé pour une analyse plus approfondie lors de l'étape d'optimisation des matériaux [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.

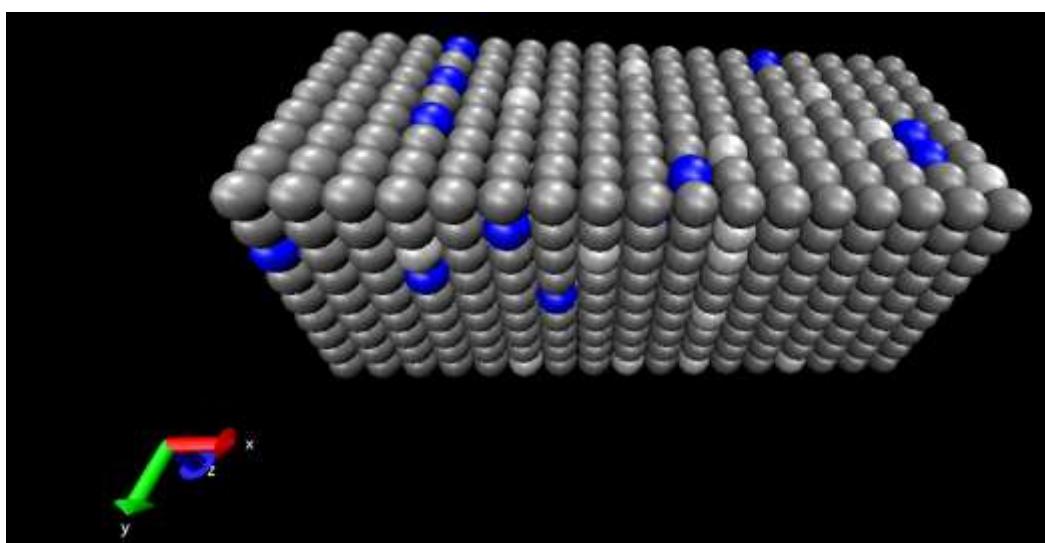


Figure 13 : Structure atomique et configuration initiale

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 vacancies et interstitiels a été observé.

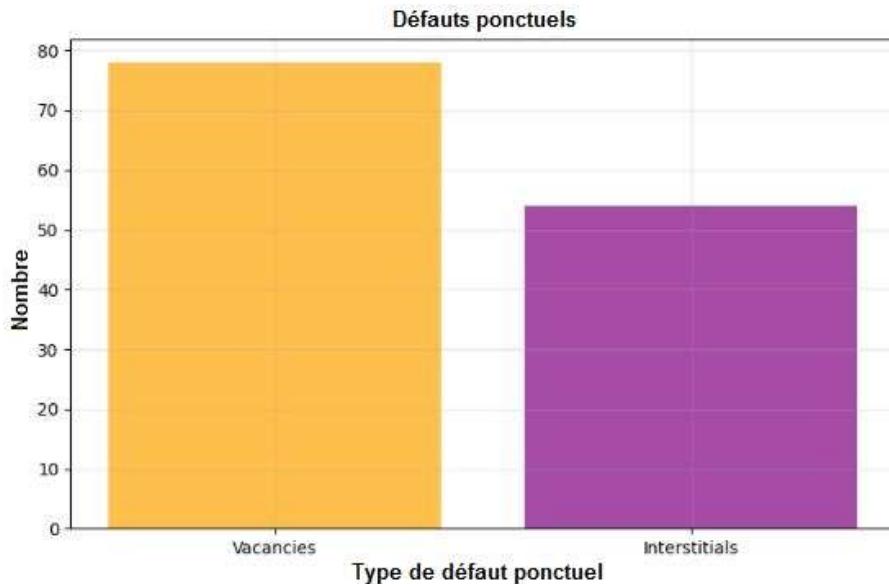


Figure 14 : Défauts cristallins

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

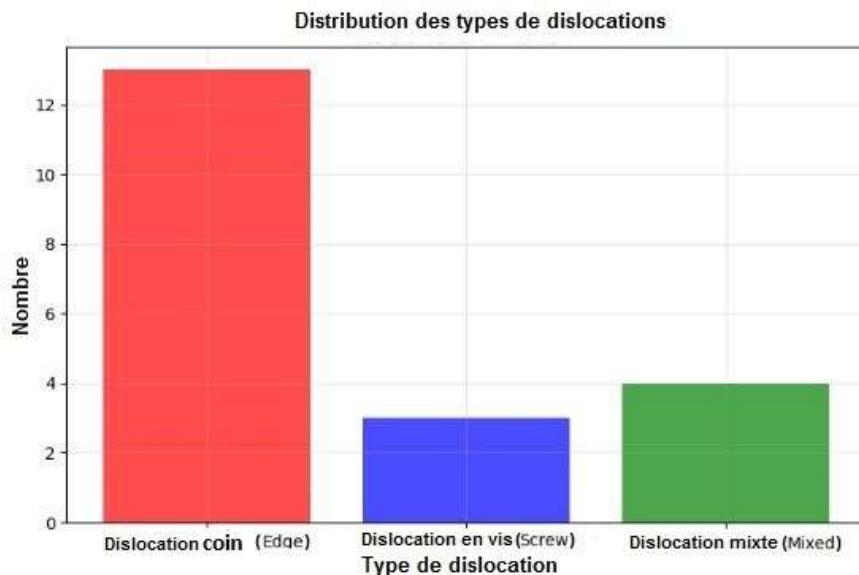


Figure 15 : Distribution des types des dislocation

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.

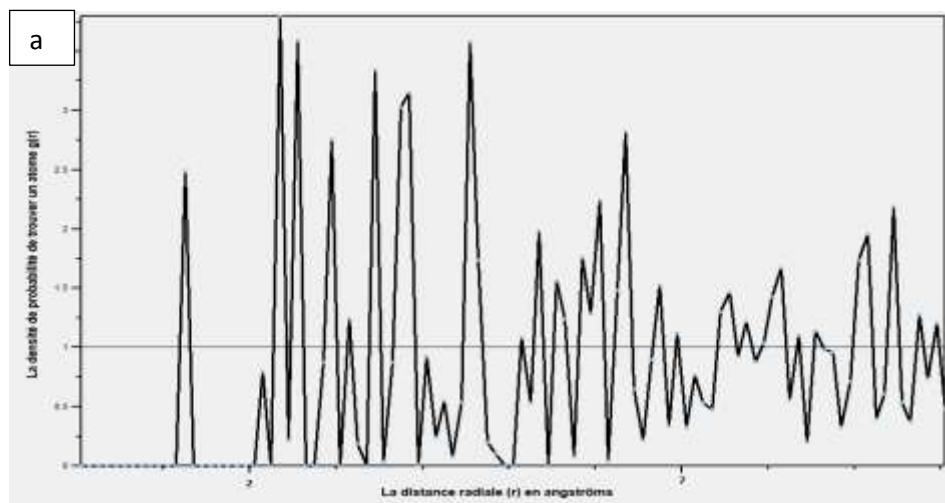


Figure 16 : Distribution des fautes d'empilement

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.



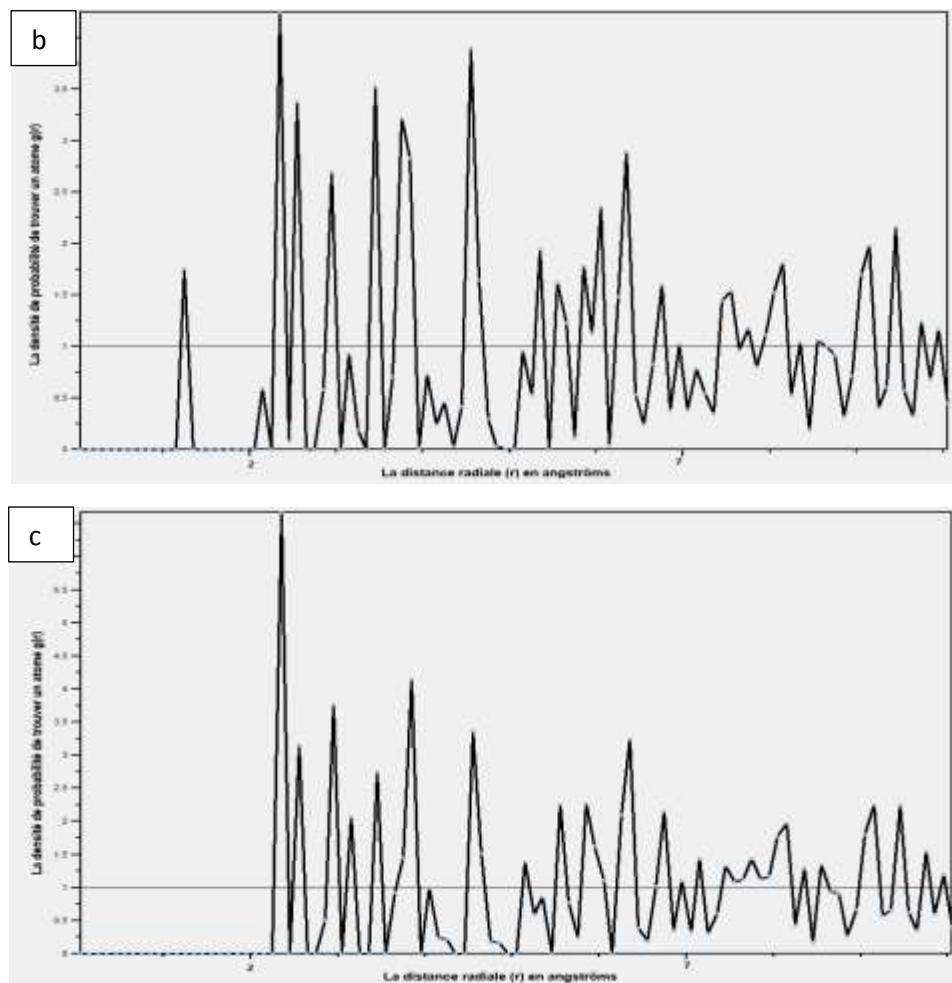


Figure 17 : Analyse de la distribution atomique dans l'alliage Ti-6Al-4V : (a) Ti autour de Al, (b) Ti autour de V, et (c) Al autour de V

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.

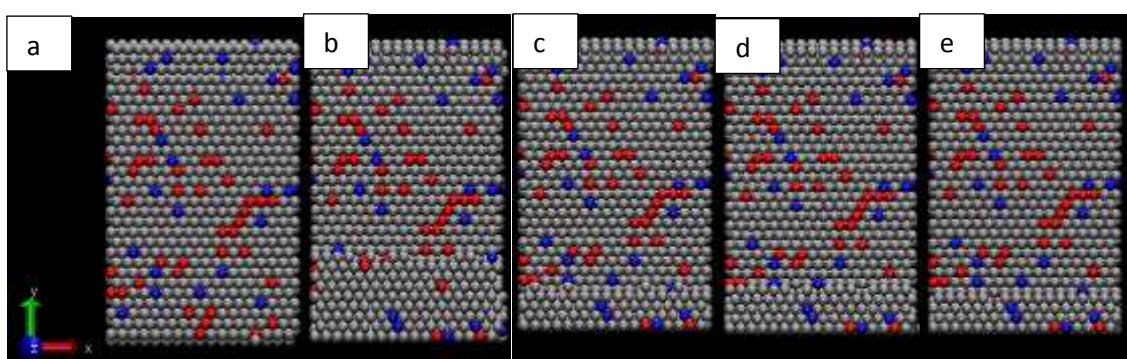


Figure 18 : L'évolution de la structure (mouvement des atomes) au fil du temps (a) 0 fs, (b) 20 fs, (c) 40 fs, (d) 60 fs, (e) 80 fs.

III.2.3. Déformation et contrainte

Les contraintes locales (composantes σ_x , σ_y , σ_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 (Δx , Δy , Δz) 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 \AA près de la région fixe à environ $0,5 \text{ \AA}$ près de la région de compression.

La déformation totale (contrainte, ϵ) 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.

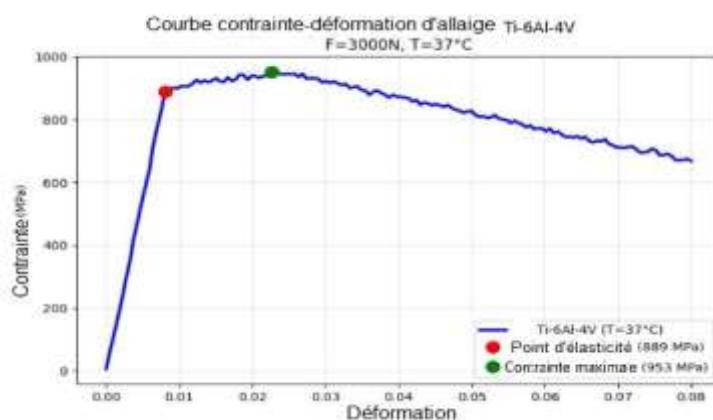


Figure 19 : Courbe Contrainte-Déformation

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 Ångströms, 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).

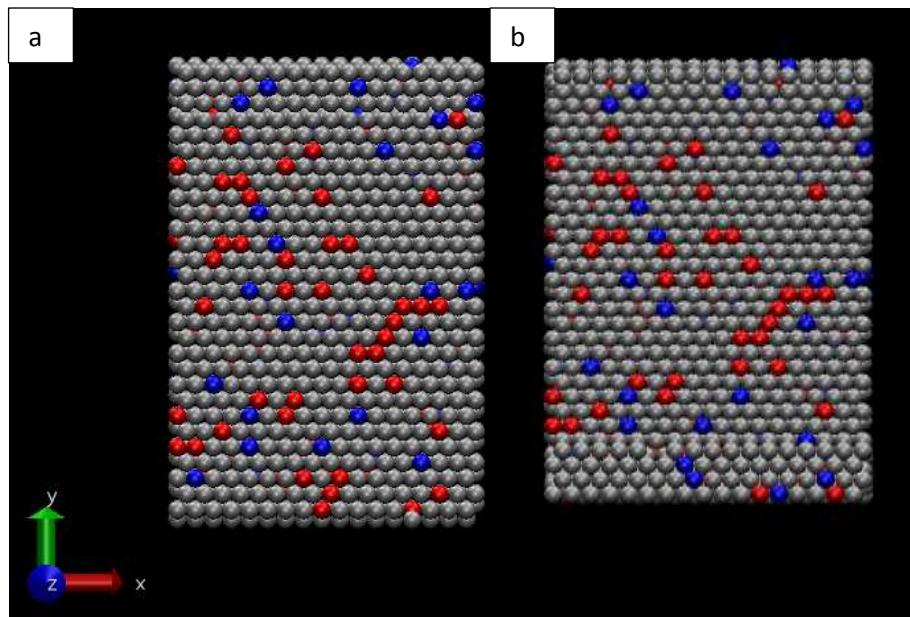


Figure 20 : Configuration atomiques (a) avant et (b) après l'essai de compression

III.2.4. Propriétés dynamiques

Écart-type quadratique moyen (RMSD) : Comparaison des changements structurels 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.

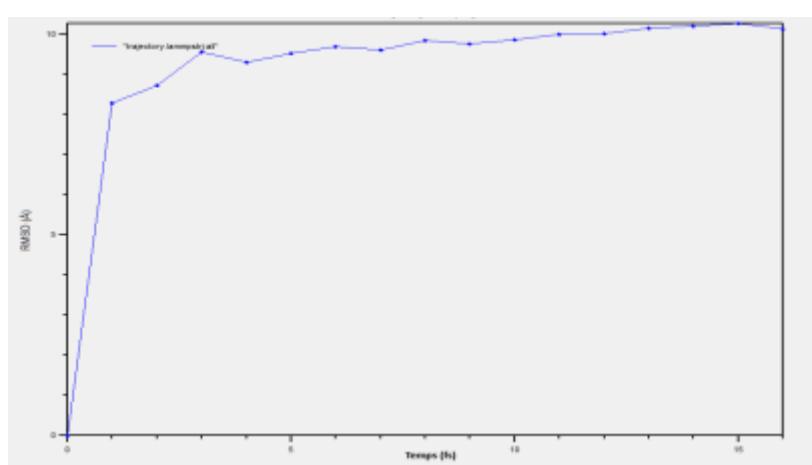


Figure 21 : Courbe du RMSD pour l'alliage Ti-6Al-4V sous une force de compression de 3000 N

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.

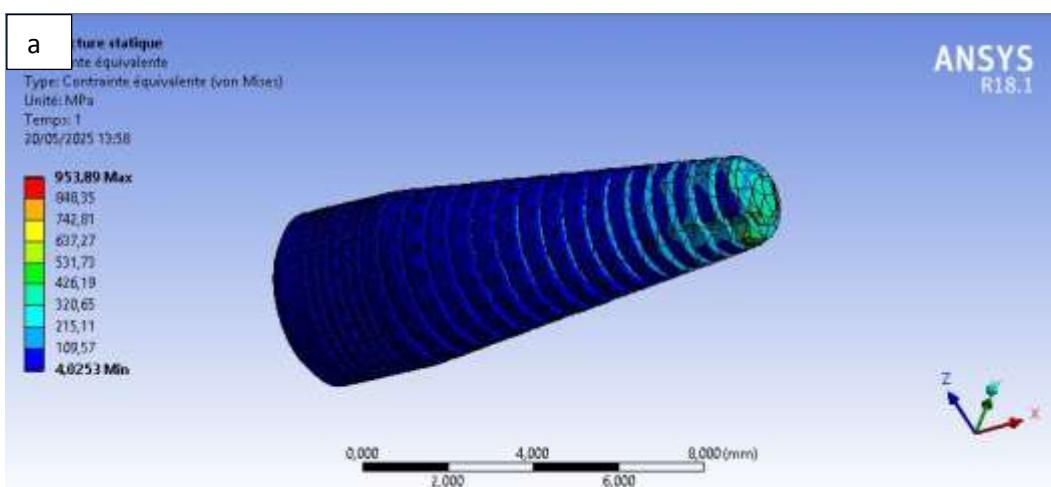
III.3. Simulations par ANSYS d'un corps d'implant dentaire à l'échelle macroscopique

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.



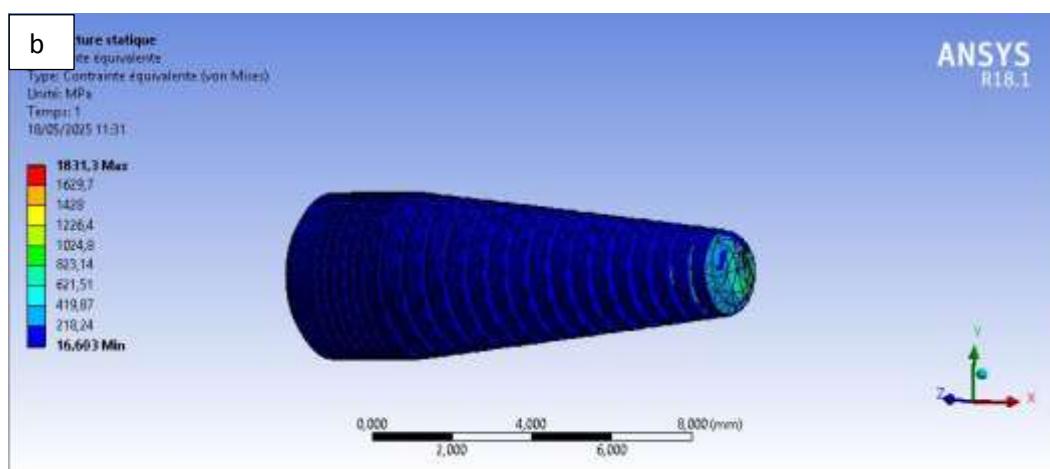


Figure 22 : Distribution des contraintes de von Mises dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.

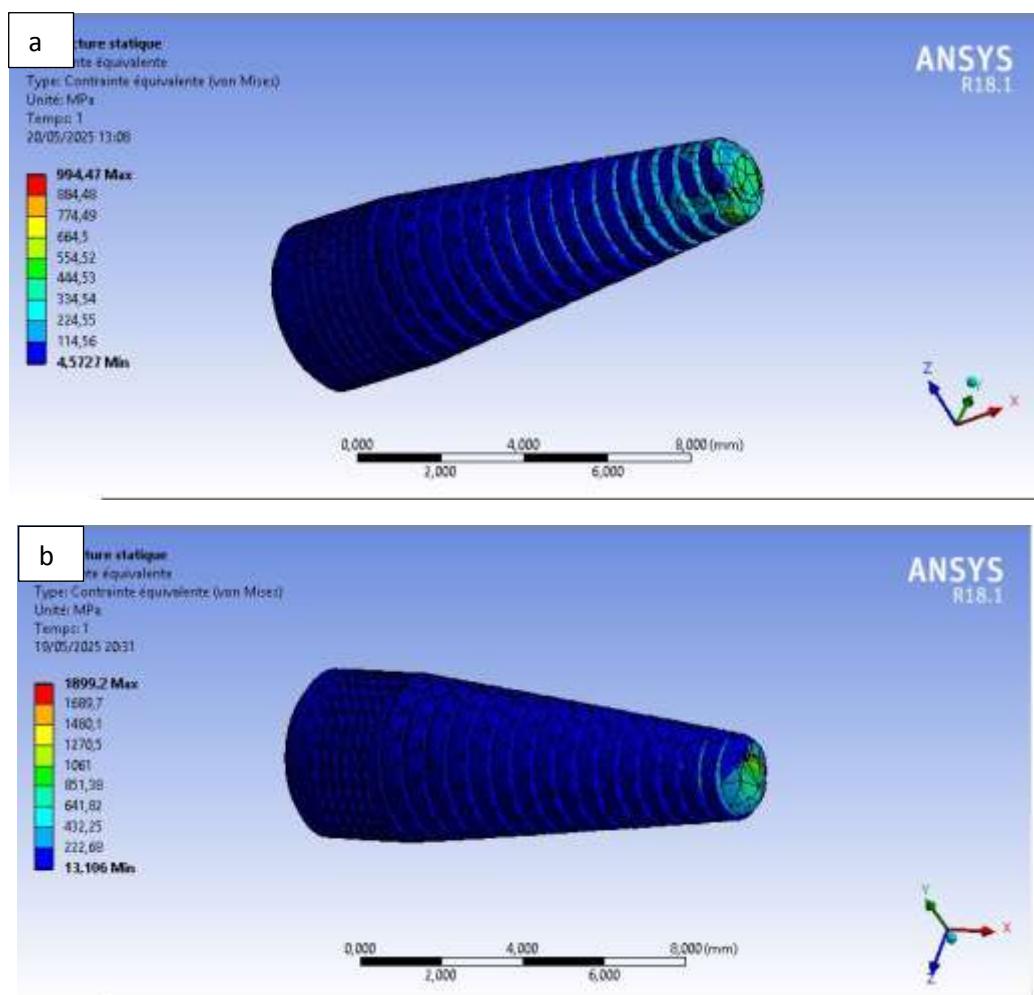


Figure 23 : Distribution des contraintes de von Mises dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Co-Cr.

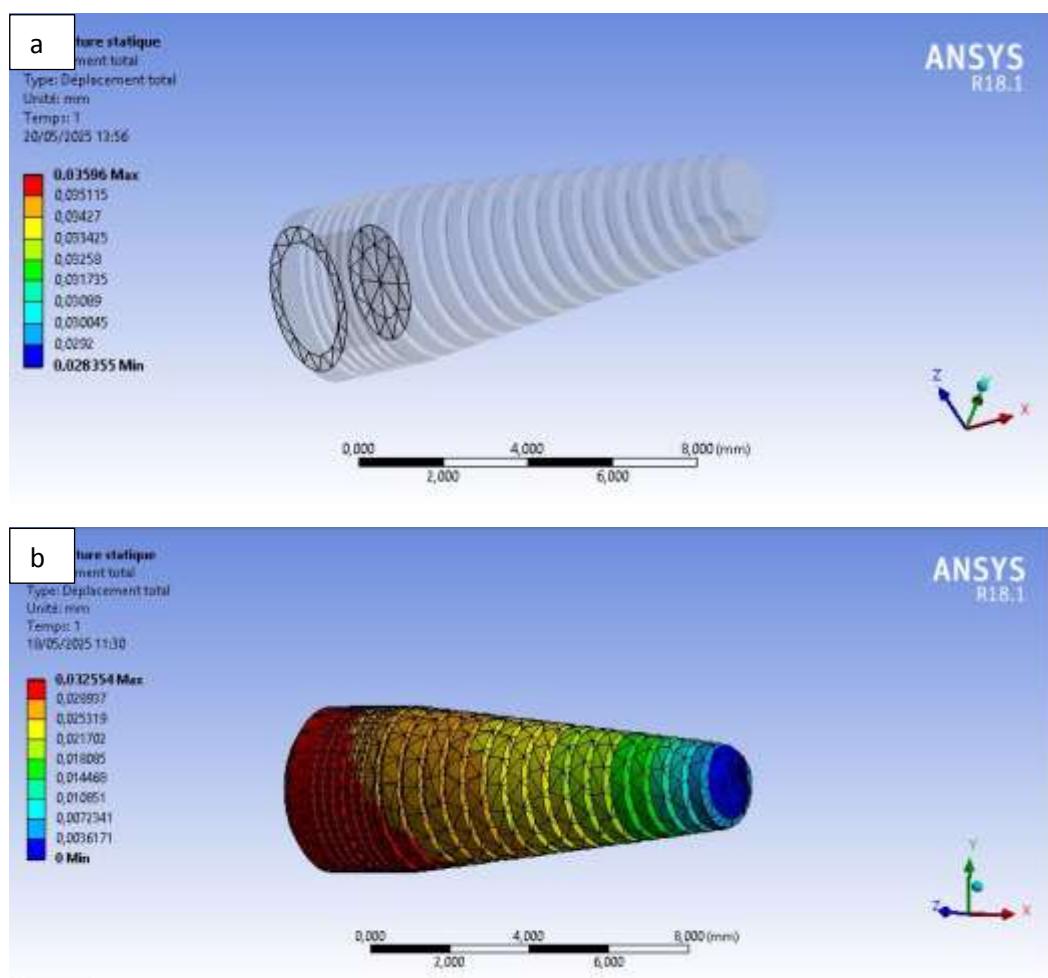
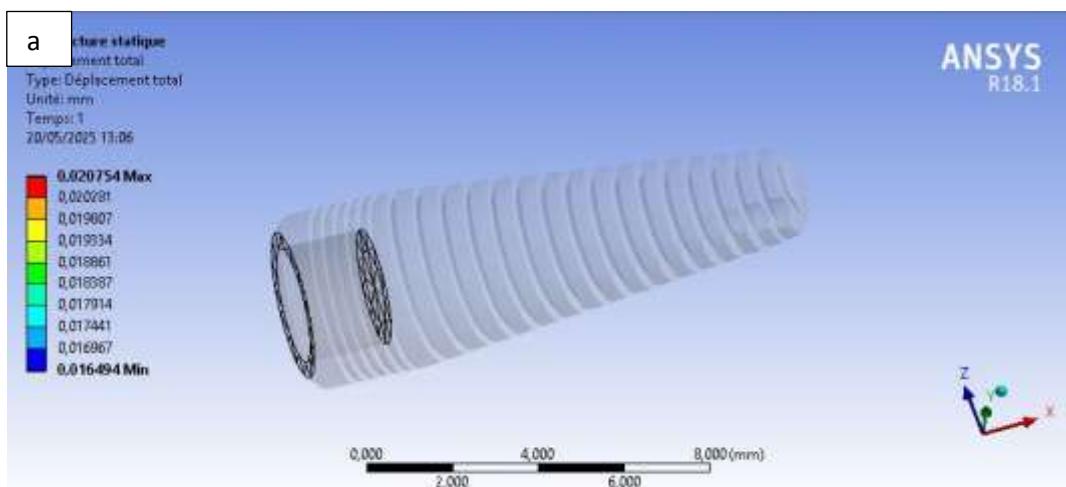


Figure 24 : Distribution des Déplacement total dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.



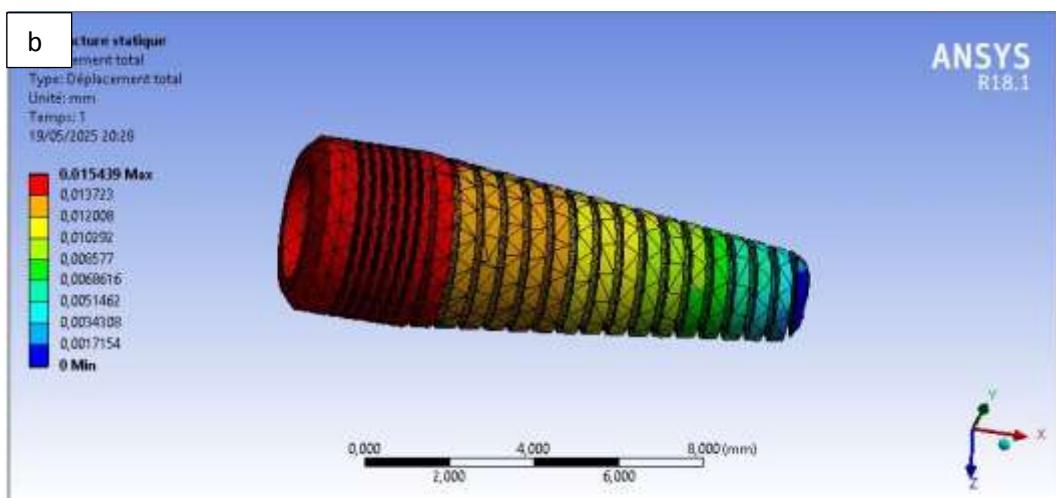


Figure 25 : Distribution des Déplacement total dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Co-Cr.

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.

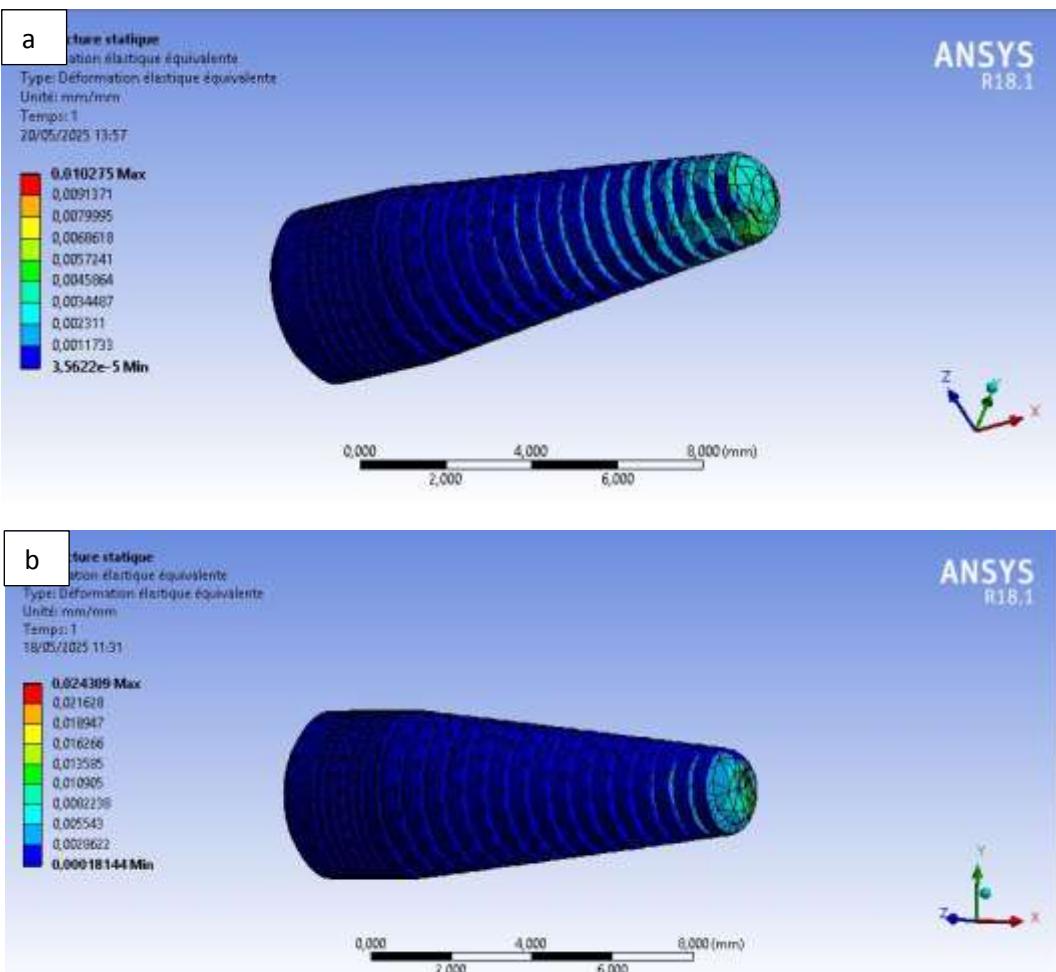


Figure 26 : Distribution des déformations équivalentes dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.

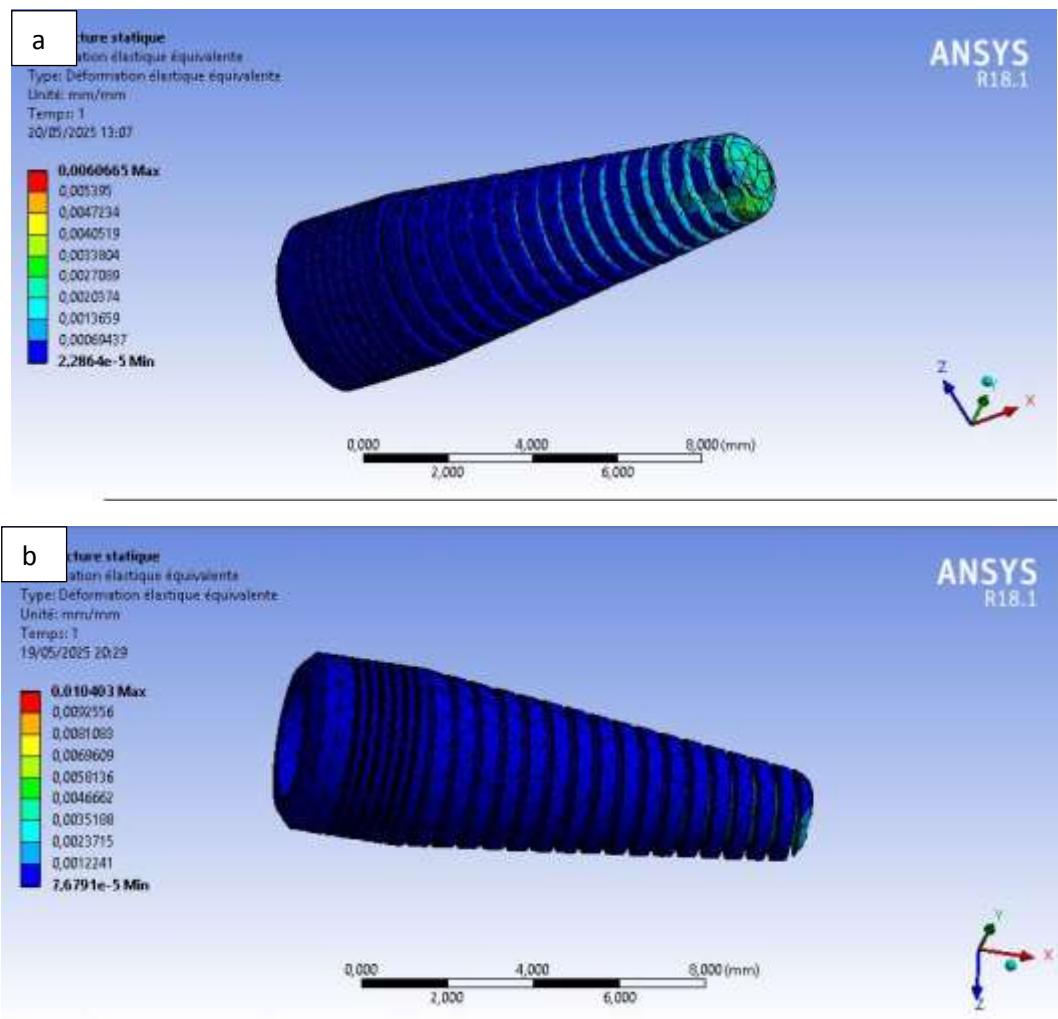


Figure 27 : Distribution des déformations équivalentes dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Co-Cr.

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].

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, distribution des 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.

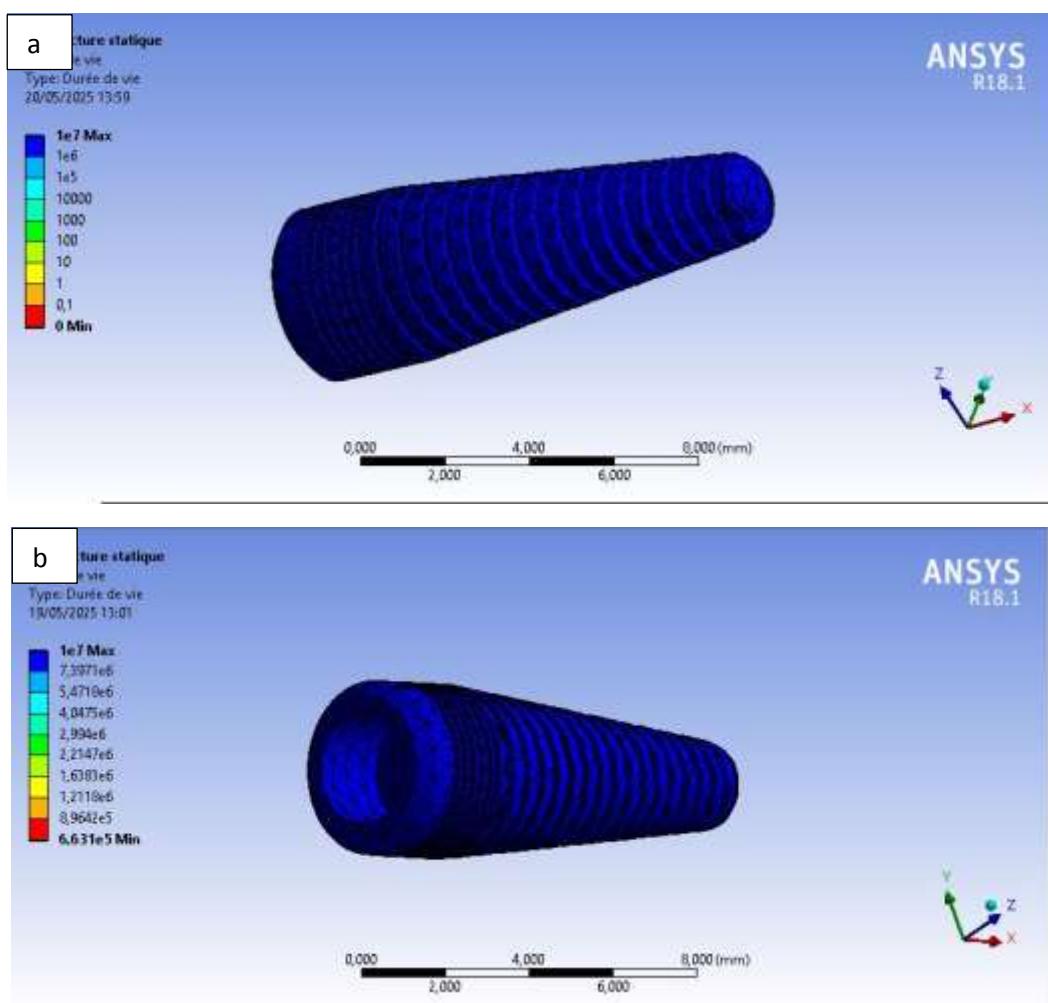
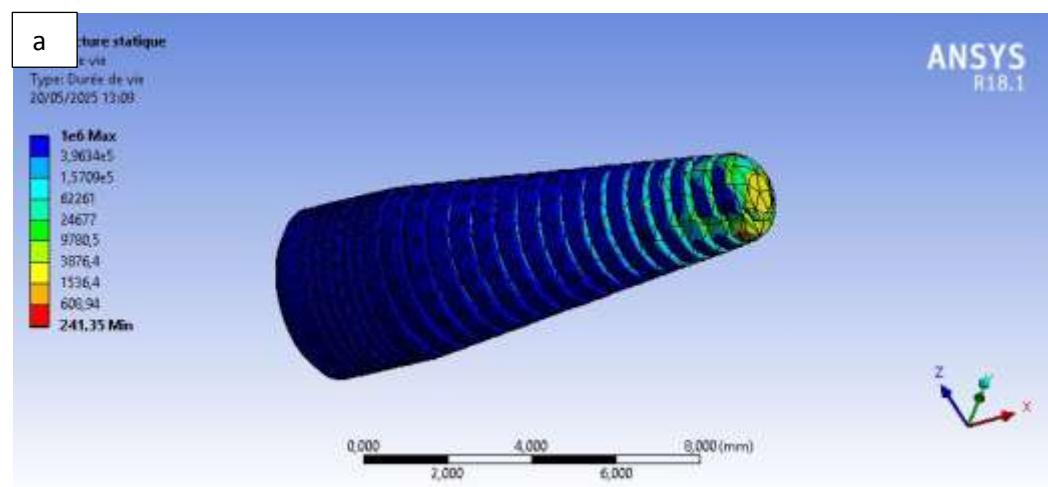


Figure 28 : Carte de durée de vie en fatigue dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.



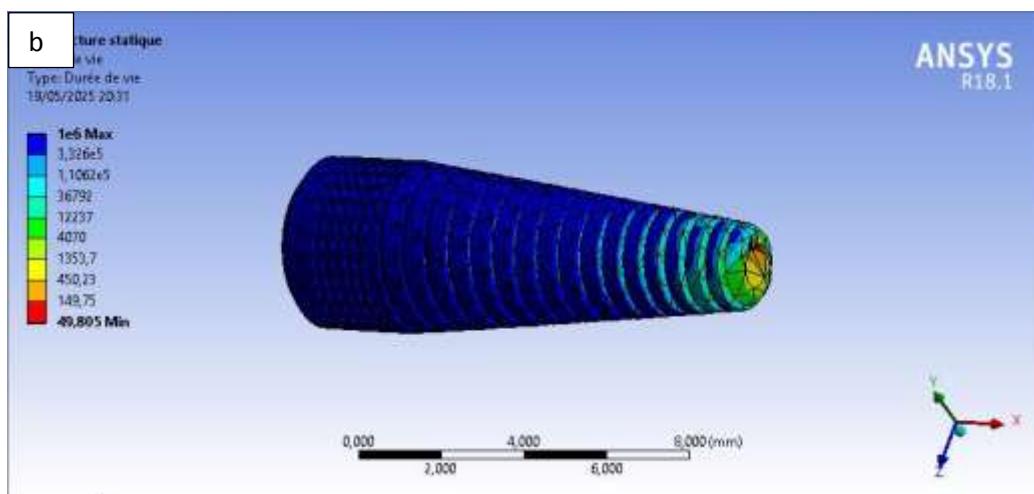


Figure 29 : Carte de durée de vie en fatigue dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Co-Cr.

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.

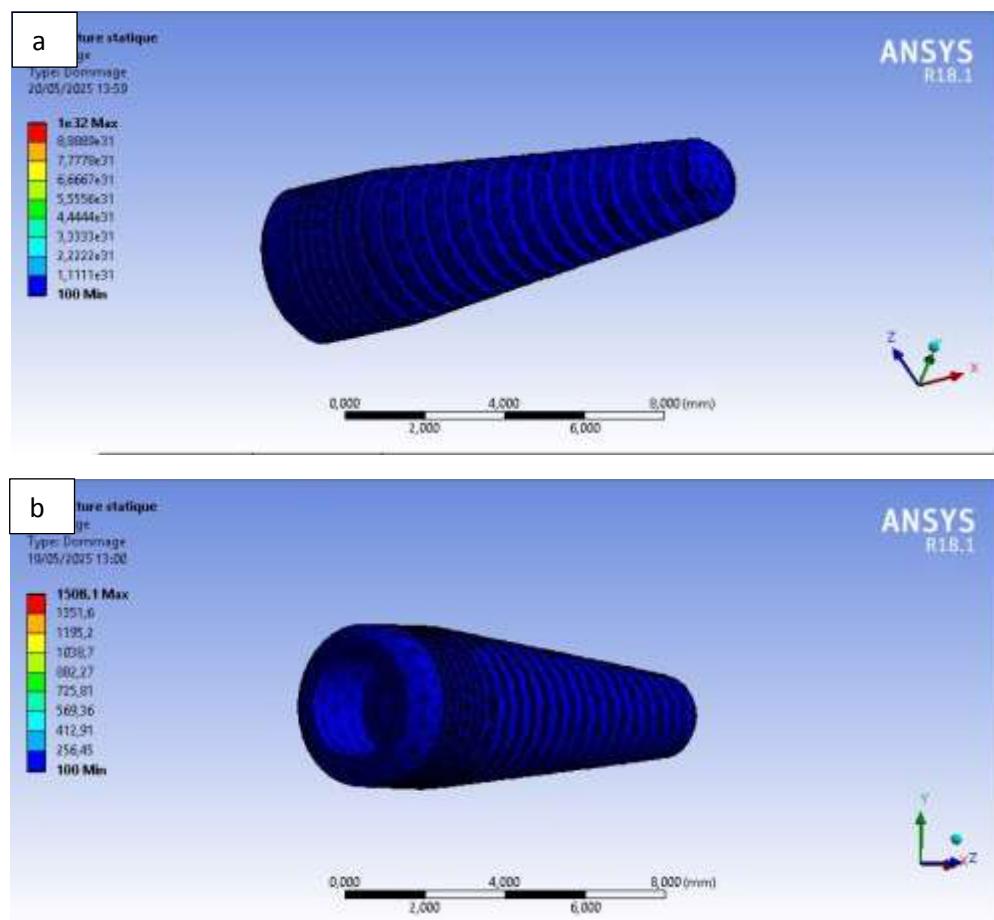


Figure 30 : Distribution des dommages dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.

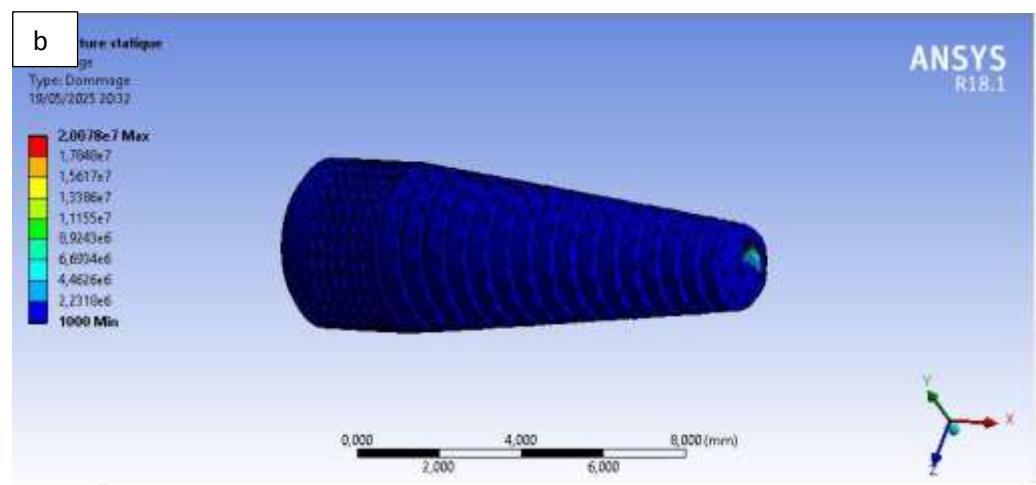
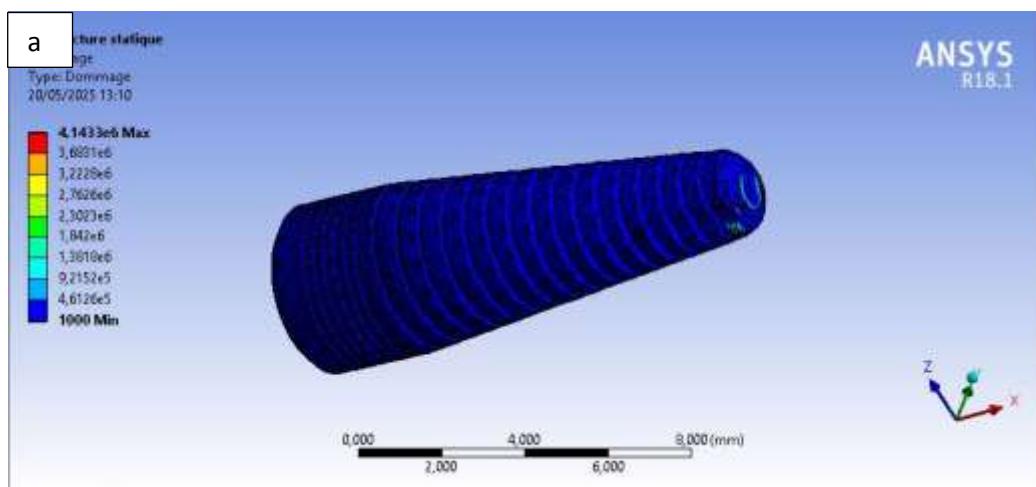
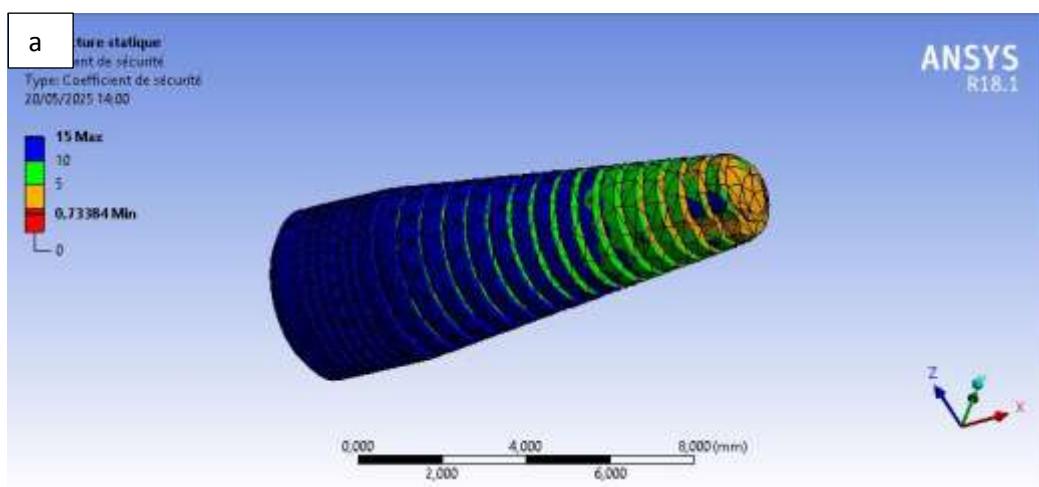


Figure 31 : Distribution des dommages dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Co-Cr.



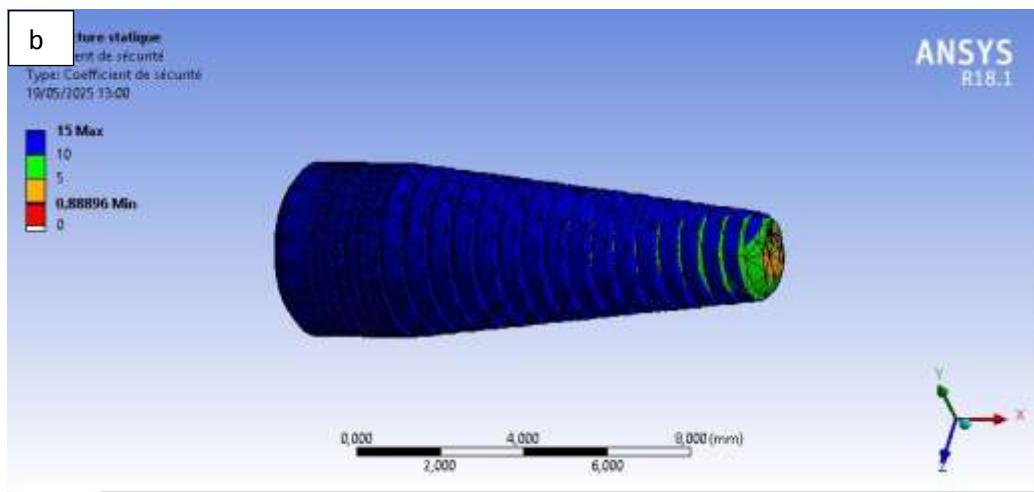


Figure 32 : Distribution des coefficients de sécurité dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Ti-6Al-4V.

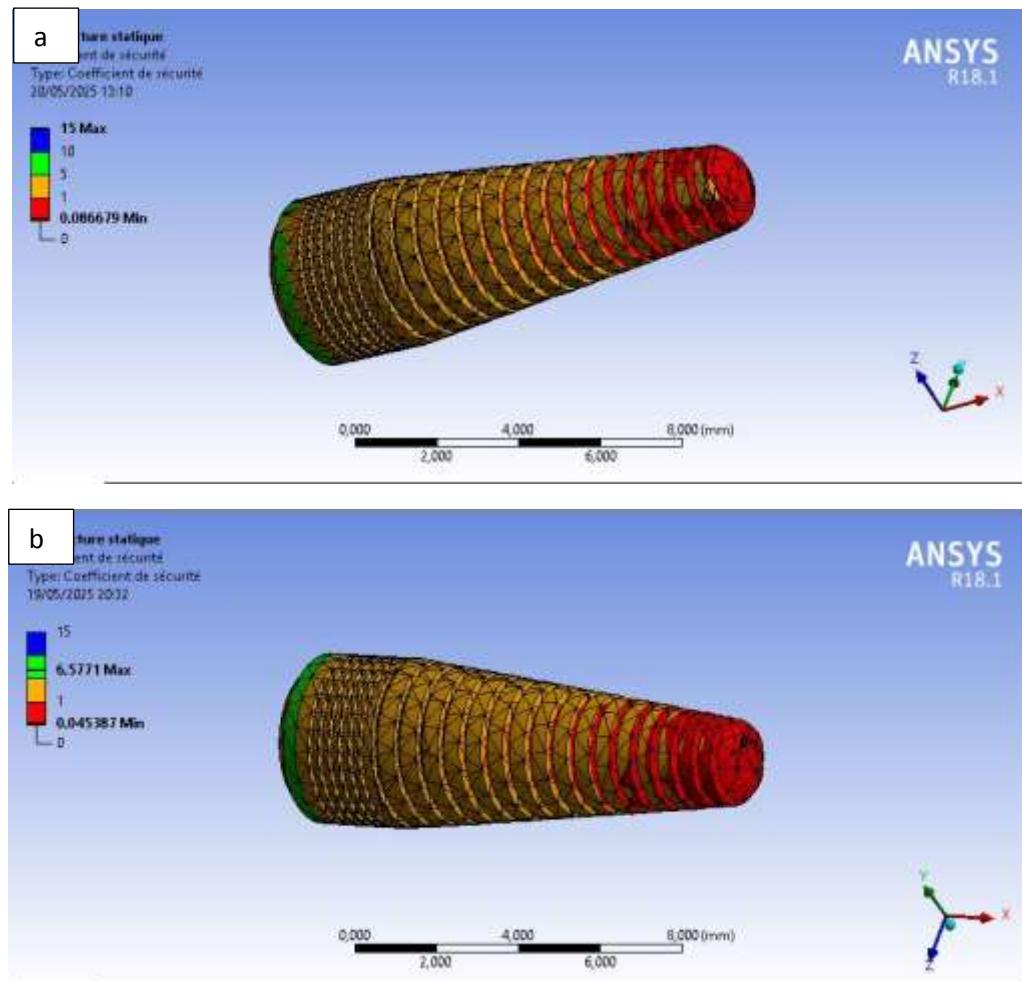


Figure 33 : Distribution des coefficients de sécurité dans un corps d'implant dentaire (a) avec et (b) sans goujure, sous une charge de 1000 N, pour l'alliage Co-Cr.

Les résultats indiquent une durée de vie estimée de 10^{17} 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. Le Ti-6Al-4V surpasse la Zirconia 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.

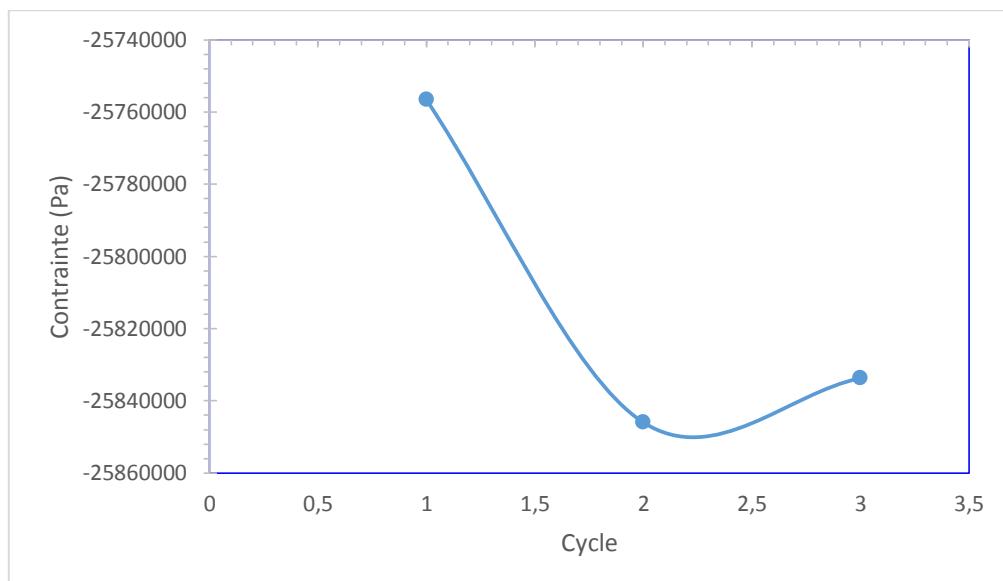


Figure 34 : Courbe de Wöhler pour déterminer la durée de vie d'alliage Ti-6Al-4V. sous des charges de 1000 N.

III.4.1.2. Caractéristiques de rupture

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

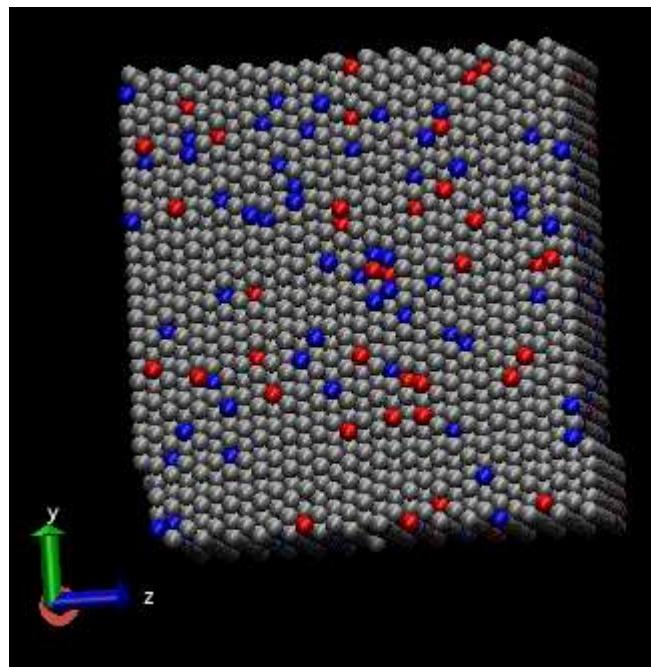


Figure 35 : Origine de la fatigue (ex. défauts de surface, fissures internes, concentrations de contraintes)

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 le cycle d'hystéresis sera très étroit (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.

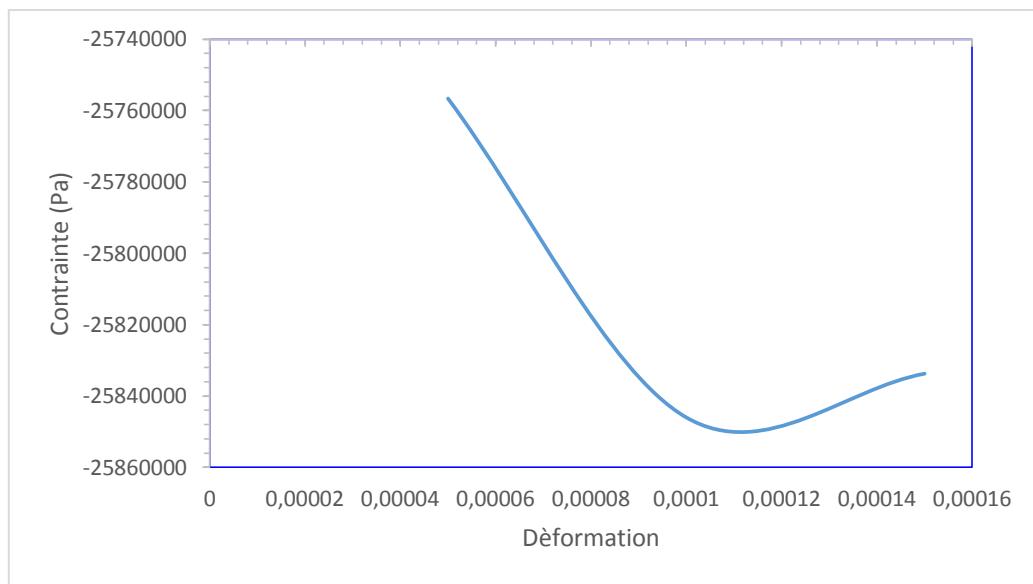


Figure 36 : Cycle d'hystérésis : montre la relation contrainte-déformation lors du chargement cyclique, révélant l'énergie dissipée.

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.

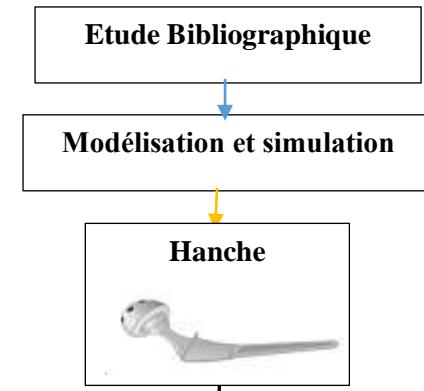
Les simulations de dynamique moléculaire réalisées avec LAMMPS et visualisées via VMD ont permis d'explorer le comportement microscopique de l'alliage, en modélisant une structure cristalline HCP avec une composition chimique précise (90 % Ti, 6 % Al, 4 % V). Ces analyses ont révélé la présence de défauts 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



Ti-6Al-4V

Cr-CO

Ti-6Al-4

Normal



Avec trous



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)

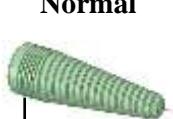
- Structure atomique et arrangement cristallin : défauts cristallin, Distribution des types des dislocation, Distribution des fautes d'empilement, La RDF ou $g(r)$.
- Trajectoires de mouvement
- Déformation et contrainte
- Configuration atomique
- Propriétés dynamiques : Calcul du RMSD ; Énergie ; Pression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

Dents



Ti-6Al-4V

Normal



Avec goujures



Normal



Durée de vie en fatigue (Courbe S-N)

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

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)

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] Bonnand, 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 (ZrO₂) Biomedical Applications: Advanced Manufacturing Techniques and Materials Properties." *Revue des Composites et des Matériaux Avancés* 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. 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] Francios, 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 Lammps 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 structurelles 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 Materiaux 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.

REFERENCES

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

```