



HAL
open science

SINUPROS: un modèle et un logiciel nano-maco pour les propriétés mécaniques de l'os cortical humain

Mihaela Racila, Jean-Marie Crolet

► **To cite this version:**

Mihaela Racila, Jean-Marie Crolet. SINUPROS: un modèle et un logiciel nano-maco pour les propriétés mécaniques de l'os cortical humain. 8e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2007, Giens, France. hal-01509003

HAL Id: hal-01509003

<https://hal.science/hal-01509003>

Submitted on 15 Apr 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Public Domain

SINUPROS : un modèle et un logiciel nano-macro pour les propriétés mécaniques de l'os cortical humain

Mihaela Racila^{****} — Jean Marie Crolet^{*,**}

* *Laboratoire de Mathématiques, UMR CNRS 6326*

** *Institut Supérieur des Ingénieurs de Franche-Comté*

Université de Franche-Comté, 16 Route de Gray, 25000 Besançon, France

mracila@yahoo.com, jmcrolet@univ-fcomte.fr

*** *Département de Mathématiques Appliquées*

Université de Craiova, 13 Rue A. I. Cuza, 200585 Craiova, Roumanie

RÉSUMÉ. Sinupros est un modèle de l'os cortical humain qui prend en compte les aspects architecturaux, multi physiques et multi-échelles de ce milieu. Tous les paramètres introduits dans chacun des cinq niveaux sont décrits, une loi de comportement permettant de prendre en compte l'effet de la minéralisation est suggérée et la théorie de l'homogénéisation est mise en œuvre pour déterminer les propriétés physiques de cette structure à chacun des niveaux concernés. Les schémas numériques évoqués sont implémentés dans un code écrit en Matlab, lequel permet aisément de simuler l'effet de chacun des paramètres. La première analyse des résultats de ce modèle qui est menée porte sur la composition minérale de ce milieu et les composantes élastiques longitudinales et transverses obtenues au niveau macroscopique.

ABSTRACT. Sinupros is a model of the human cortical bone that takes into account the architectural, multiphysics and multi scale aspects of this medium. All the introduced parameters in each of the five levels are described, a behavior law allowing the modelisation of the mineralization effect is suggested and the homogenization theory is used in order to determine the physical properties at each level of this structure. The numerical algorithms are implemented in a software based on Matlab which allows easily simulating the effect of each parameter. The first analysis of the results which is pursued deals with the mineral composition of this medium and with the longitudinal and transverse elastic properties obtained at the macroscopic scale.

MOTS-CLÉS : Os cortical humain, Homogénéisation, Piézoélectricité, Minéralisation osseuse, Multi-échelle, Lois de comportement évolutives.

KEYWORDS: Human cortical bone, Homogenization, Piezoelectricity, Bony mineralization, Multi-scale, Evolving behavior laws

1. Introduction

La présente modélisation de l'os cortical humain s'appuie sur les études déjà réalisées au sein de notre groupe (Aoubiza et al., 1996) mais elle est plus complète car elle incorpore de nombreux paramètres qui avaient été ignorés. Une analyse descendante complète de l'architecture corticale conduit à considérer finalement dix huit paramètres géométriques. Pour déterminer les propriétés physiques macroscopiques, l'outil mathématique le mieux adapté est incontestablement la théorie de l'homogénéisation. Or, si l'on considère que l'un des deux composants de base a des propriétés piézoélectriques, cette théorie montre que le matériau homogénéisé aura également, au niveau macroscopique, des propriétés piézoélectriques. Mais, comme il est maintenant bien admis que l'os humain n'a, au niveau macroscopique, aucune propriété piézoélectrique, il faut également affiner le modèle au niveau des lois de comportement.

2. Modélisation

L'os cortical humain peut être considéré comme un matériau composite, les fibres étant l'ostéon et la matrice étant le système interstitiel (SI) c'est-à-dire un milieu formé d'ostéons surminéralisés qui ont été détruits lors du remodelage. Les entités importantes sont la minéralisation et l'entité "ostéon" qui, de par sa géométrie tubulaire est caractérisé par un diamètre et par une porosité. Ces canaux dits de Havers, sont orientés dans la direction longitudinale et sont reliés entre eux par les canaux de Volkmann situés dans des plans transverses. Il faut ajouter les paramètres suivants : l'écart entre deux ostéons, l'écart entre l'ostéon et le SI (ligne cémentante), l'écart entre deux canaux de Volkmann et la porosité de Volkmann (en remplacement du diamètre de ce canal).

L'ostéon n'est pas homogène. Constitué de lamelles emboîtées les unes dans les autres, on le paramètre par l'épaisseur lamellaire et l'épaisseur de l'espace entre deux lamelles. Ces lamelles étant traversées par de petits canaux (les canalicules), on prend en compte ce volume canaliculaire pour l'ostéon courant et le SI.

La lamelle, non homogène, est considérée comme un composite, les fibres étant des entités de collagène (que l'on assimile à des cylindres) et la matrice un milieu formé de cristaux et de fluide : il est alors nécessaire d'introduire le diamètre du cylindre, l'écart entre deux tels cylindres et l'orientation de ces cylindres.

Concernant la minéralisation, une entité abstraite, le volume élémentaire de contenu minéral (EVMC – Elementary Volume of Mineral Content) a été introduit (Crolet et al., 2005), (Racila et al. 2006). Il est paramétré par les pourcentages d'EVMC et d'eau liée respectivement dans l'ostéon courant et dans le SI. On adjoint un coefficient d'anisotropie à cette échelle car ce modèle de minéralisation est trop grossier.

Suivant cette description, le modèle SiNuPrOs contient 18 paramètres qui sont distribués comme suit: 6 pour le système Haversien, 4 pour l'ostéon, 3 pour l'architecture lamellaire et 5 pour la structure minérale. Il faut ajouter toutes les caractéristiques physiques qui sont en nombre de dix (densités du collagène et de l'Hap, modules d'Young de l'Hap et du collagène, coefficients de Poisson de l'Hap et du collagène, tenseurs piézoélectriques et diélectriques du collagène, tenseur diélectrique pour les EVMC et le fluide). En conclusion, cette description tant géométrique qu'architecturale fait de SiNuPrOs un modèle particulièrement complet. L'homogénéisation d'un milieu composite constitué de fibres piézoélectriques incluses dans une matrice élastique caractérisé par les lois de comportement suivantes :

$$\sigma_{ij} = \left[C_{ijkh}^{fib} \cdot \varepsilon_{kh}^{fib} + g_{kij}^{fib} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right] \cdot \chi^{fib} + \left[C_{ijkh}^{mat} \cdot \varepsilon_{kh}^{mat} \right] \cdot \chi^{mat}; \quad D_i = \left[g_{ikh}^{fib} \cdot \varepsilon_{kh}^{fib} - \alpha_{ik}^{fib} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right] \cdot \chi^{fib} - \alpha_{ik}^{mat} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \cdot \chi^{mat}$$

avec les notations classiques, χ étant la fonction caractéristique conduit à :

$$\sigma_{ij} = \left[C_{ijkh}^{hom} \cdot \varepsilon_{kh}^{hom} + g_{kij}^{hom} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right]; \quad D_i = \left[g_{ikh}^{hom} \cdot \varepsilon_{kh}^{hom} - \alpha_{ik}^{hom} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right]$$

Ceci sous entend qu'au niveau macroscopique l'os cortical serait un matériau piézoélectrique ce qui est faux sur le plan physique. Devant concilier la nature piézoélectrique du collagène et cette réalité physique, on introduit une nouvelle loi de comportement dite "évolutive". Soit m_d le degré de minéralisation et considérons une valeur seuil de minéralisation $m_{d_{th}}$ qui représente la valeur de minéralisation au delà de laquelle l'effet piézoélectrique disparaît. On note $(m_{d_{th}} - m_d)_+$ la partie positive de $(m_{d_{th}} - m_d)$ et on considère la fonction μ :

$$\mu = \frac{(m_{d_{th}} - m_d)_+}{m_{d_{th}}}$$

On suggère alors d'utiliser une loi de comportement évolutive donnée par :

$$\sigma_{ij} = \left[C_{ijkh}^{hom} \cdot \varepsilon_{kh}^{hom} + \mu \cdot g_{kij}^{hom} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right]$$

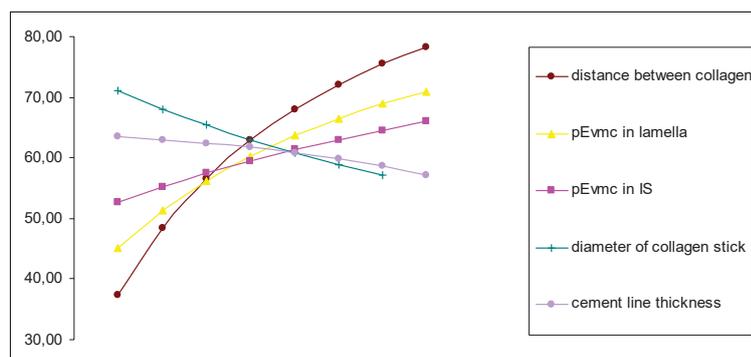
$$D_i = \mu \cdot \left[g_{ikh}^{hom} \cdot \varepsilon_{kh}^{hom} - \alpha_{ik}^{hom} \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x_k} \right]$$

Cette loi modélise mieux "l'évanouissement" de l'effet piézoélectrique. Il est facile de voir que s'il n'y a pas minéralisation ($m_d = 0$) alors $\mu = 1$ et la loi homogénéisée obtenue est piézoélectrique et que si la minéralisation courante est égale ou supérieure à la valeur seuil alors $\mu = 0$ et la loi homogénéisée est une loi élastique. Cette loi peut être utilisée seulement si on connaît la valeur seuil de minéralisation. Sans autre information de la littérature, on prend comme valeur seuil la valeur minimale de la minéralisation du système interstitiel.

3. Résultats et discussion

Il est admis que l'os cortical humain sec contient 63 % de contenu minéral et 37 % de contenu organique. Nous cherchons d'abord un ensemble de valeurs pour nos paramètres qui donne ces proportions. Il n'y a pas unicité et nous en choisissons arbitrairement un que nous appelons "configuration de référence". S'il est possible de trouver dans la littérature (Rho et al., 1998) des informations sur les intervalles de variation de certains paramètres, il faut, pour d'autres (pourcentages d'EVMC et d'eau liée dans la lamelle courante et dans le système interstitiel et coefficient d'anisotropie nanoscopique) choisir des valeurs en accord avec le problème physique. On donne ci-après les valeurs respectives : diamètre ostéonal : 100 μm , écart entre deux ostéons : 0 μm , distance entre deux canaux de Volkmann : 150 μm , épaisseur de la ligne cimentante : 1 μm , épaisseur d'une lamelle : 1 μm , épaisseur inter lamellaire : 0 nm, porosité haversienne : 7 %, porosité Volkmann : 5 %, diamètre d'un bâtonnet de collagène : 75 nm, écart entre deux bâtonnets de collagène : 25 nm, volume des canalicules dans la lamelle courante : 3 %, volume des canalicules dans le système interstitiel : 0 %, degré de minéralisation dans la lamelle courante : 38 %, degré de minéralisation dans le système interstitiel : 75 %, pourcentage d'eau liée dans la lamelle courante : 8 %, pourcentage d'eau liée dans le système interstitiel : 5 %, densité de l'Hap : 3100 g/cm^3 , densité du collagène : 1100 g/cm^3 , coefficient de l'anisotropie nanoscopique : 1. On peut noter que cette configuration de référence n'est pas unique. La configuration de référence retenue n'est pas importante pour elle-même mais elle est nécessaire pour pouvoir organiser l'étude paramétrique qui suit.

Cette configuration de référence étant arbitrairement fixée, nous faisons évoluer chacun des dix huit paramètres séparément dans un intervalle de valeurs approprié pour chacun d'eux. Les résultats obtenus permettent de classer ces paramètres en deux groupes : ceux qui ont un effet important sur le pourcentage de contenu minéral et ceux qui n'ont pas un effet majeur (moins que 8 %). Les cinq paramètres qui ont une forte influence sur le pourcentage d'Hap sont les suivants : l'écart entre deux bâtonnets de collagène, le pourcentage des EVMC dans la lamelle courante et dans le système interstitiel, le diamètre d'un bâtonnet de collagène et l'épaisseur de la ligne cimentante. Leurs variations, comprises entre 35% et 80% sont présentées sur la figure 1.



Sur la Figure 1, il n'y a pas d'axe des abscisses car la nature de l'abscisse dépend de paramètre même et toutes les X-coordonnées ont été superposés.

Figure 1. Variations des 5 paramètres sur le pourcentage d'Hap

L'analyse de ces résultats montre que les effets calculés sont en général non linéaires. Les premiers trois paramètres (écart entre les bâtonnets de collagène, pourcentage des EVMC dans la lamelle et dans le système interstitiel) ont une influence croissante. Ce phénomène peut être expliqué facilement : la hausse de l'écart entre les bâtonnets de collagène induit une décroissance de la masse du collagène dans chaque volume élémentaire et donc une croissance du volume occupé par les EVMC et le fluide. Pour les mêmes pourcentages de minéralisation dans la lamelle courante et/ou dans le système interstitiel, la masse d'Hap va monter. Par ailleurs, si le pourcentage des EVMC augmente, alors la minéralisation elle-même va augmenter et ce sera pareil pour le pourcentage en masse d'Hap. Les deux paramètres qui suivent ont des effets assez différents : une croissance de ces paramètres induit une décroissance du pourcentage de l'Hap. En effet, si le diamètre du bâtonnet de collagène (respectivement l'épaisseur de la ligne cimentante) augmente, alors le volume qui peut être occupé par des EVMC baisse ainsi que le pourcentage d'Hap.

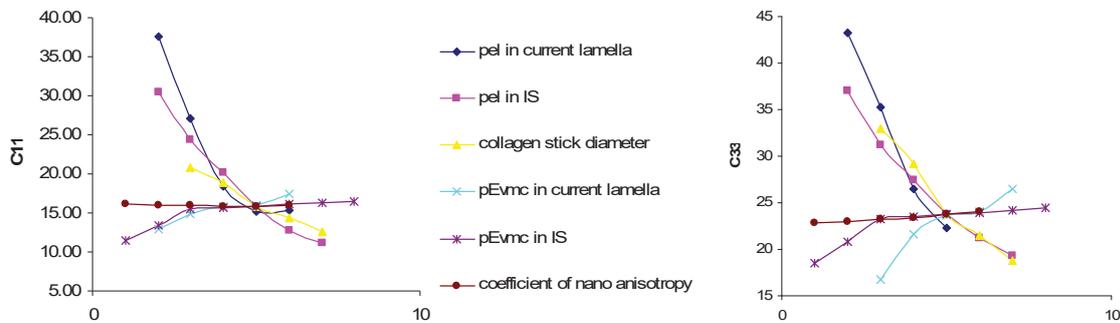


Figure 2. Effets des principaux paramètres sur C_{11} et C_{33} (cas 45/-45)

Pour "la configuration de référence" les propriétés élastiques obtenues avec SiNuPrOs sont résumées ci après. Le rapport des composants longitudinal et transversal représente souvent une caractéristique importante et, avec les valeurs antérieures, on trouve les rapports suivants : pour une orientation des fibres de $45^\circ/-45^\circ$, $C_{33}/C_{11}=1.5$ et $E_3/E_1=1.42$; pour une orientation verticale des fibres de collagène, $C_{33}/C_{11}=2.22$ et $E_3/E_1=1.94$; pour une orientation des fibres de $0^\circ/90^\circ$, $C_{33}/C_{11}=1.58$ et $E_3/E_1=1.60$

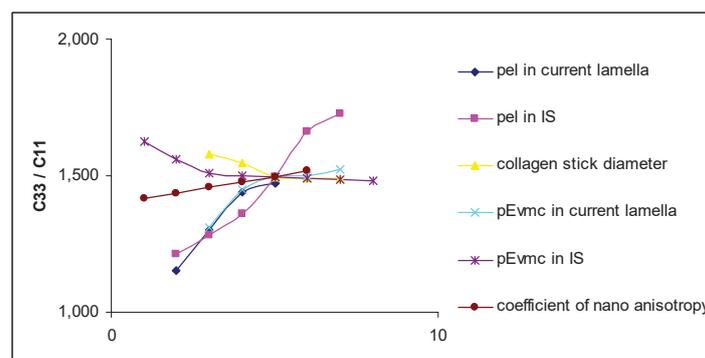


Figure 3. Evolution du rapport C_{33}/C_{11} pour les principaux paramètres (cas 45/-45)

Le premier résultat à noter est l'influence majeure de l'orientation des bâtonnets de collagène.

Ces résultats sont obtenus à partir d'un programme que l'on a écrit en Matlab disponible sur le site de l'UFC à l'adresse <http://www-math.univ-fcomte.fr/Sinupros.zip>. Il sont en bon accord avec les résultats expérimentaux, comme par exemple (Katz et al., 1987) ou (Meunier et al., 1989) et une analyse des résultats aux niveaux inférieurs est en cours.

L'intérêt de ce logiciel est soit de pouvoir évaluer les propriétés physiques d'une configuration donnée, soit de chercher, par tests successifs, les configurations correspondant à des propriétés mesurées. Or le temps calcul étant relativement long (de 10 à 45 minutes selon les configurations testées), la recherche d'une configuration peut prendre des heures. Afin de diminuer ce temps, une version interpolée est en cours de réalisation et l'obtention des résultats est immédiate. La configuration recherchée étant alors obtenue, elle doit alors être validée par la version originale.

4. Bibliographie

- Aoubiza B., Crolet J. M., Meunier A., "On the mechanical characterization of compact bone structure using the homogenization theory", *Journal of Biomechanics*, vol. 29, no. 12, pp. 1539-1547, 1996
- Crolet J.M., Racila M., Mahraoui R., Meunier A., "New numerical concept for hydroxyapatite in human cortical bone", *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, Vol. 8 (2), pp. 139-143, 2005
- Katz J.L., Meunier A., "The elastic anisotropy of bone", *J. Biomech*, Vol. 20, N° 11/12, pp 1063-1070, 1987
- Meunier A., Riot O. Christel P., Katz J.L., Sedel L., "Inhomogeneities in anisotropic elastic constants of cortical bone", *Ultrasonics symposium*, pp 1015-1018, 1989
- Racila M., Crolet J.M., "Human cortical bone: computer method for physical behavior at nano scale. Constant pressure assumption", *Technology and Health Care – Journal of the European Society for Engineering and Medicine*, IOS Press, Vol. 14, No. 4,5, pp. 379-392, 2006
- Racila M., Crolet J.M., "Nano and macro structure of cortical bone: numerical investigations", *3th European Conference on Computational Mechanics Solids, Structures and Coupled Problems in Engineering*, Lisbon, june 2006
- Rho J-Y, Kuhn-Spearing L, Zioupos P, "Mechanical properties and the hierarchical structure of bone", *Medical Engineering & Physics*, 20, pp. 92-102, 1998