



## PROPOSITION DE STAGE DE NIVEAU MASTER OU PFE

**Titre du stage :** Simulation numérique de la dissolution électrochimique des aciers inoxydables

**Durée du stage :** 6 mois

**Date de début :** 1 mars 2018

**Date de fin :** 31 aout 2018

**Tuteurs :** Brahim MALKI et Yves WOUTERS

**Laboratoire d'accueil :** Le laboratoire SIMAP (Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés) situé à Grenoble regroupe physiciens, mécaniciens et chimistes des matériaux et des fluides sur des objectifs relevant de la conception et de l'élaboration de matériaux et de procédés (<http://simap.grenoble-inp.fr>).

### PROJET

Ce stage se situe dans le cadre du projet SIM-DEC 2017 dont l'objectif est de développer une approche multiéchelle de la simulation numérique de la dissolution électrochimique des aciers inoxydables. Un code de simulation à l'échelle atomique de la cinétique de dissolution utilisant la méthode Monte-Carlo a ainsi été mis au point. Plusieurs campagnes de calcul ont été conduites et les résultats montrent clairement que : suivant le type d'acier, l'acidité du milieu et le niveau de polarisation électrochimique, différents mécanismes de dissolution peuvent être identifiés.

**L'objectif du stage** est de poursuivre les simulations en conduisant une étude comparative approfondie entre plusieurs aciers inoxydables. Il s'agit de :

- 1) conduire une procédure de validation des simulations sur la base d'un plan d'expérience existant.
- 2) d'étudier l'influence de l'orientation et des défauts cristallographique sur la vitesse moyenne de dissolution des aciers.
- 3) d'analyser le rôle des contraintes résiduelles sur les cinétiques de dissolution, une attention particulière sera portée aux systèmes biphasés (aciers duplex).

Le but de ces travaux est de déduire les lois de comportement en dissolution des aciers inoxydables en situation de corrosion (faible polarisation) et de décapage électrolytique (forte polarisation).

Ce projet se déroulera essentiellement au SIMAP. Il sera supervisé par Brahim MALKI de **SIMORG Computing** et de Yves WOUTERS du **laboratoire SIMAP** et coordonné par Ismaël GUILLOTTE d'**APERAM**. Une maîtrise de l'environnement Linux et des connaissances en langage de programmation type shell/python/C++ sont un plus.

**Personnes à contacter :** [Brahim.MALKI@simorg-computing.fr](mailto:Brahim.MALKI@simorg-computing.fr), [Yves.Wouters@simap.grenoble-inp.fr](mailto:Yves.Wouters@simap.grenoble-inp.fr)