

# Connection to the Thermo-Calc PC using X2Go:

---

- 1) Install the X2Go Client software on your computer: available at [wiki.x2go.org](<https://wiki.x2go.org>).
  - 2) Open the software and add a new session (click on **Session → New session**).
  - 3) In the session settings, enter the following information:
    - **Host:** 193.49.173.62 - **Username:** Your EMSE username - **SSH Port:** 22 - **Session Type:** ICEWM
  - 4) Leave the other options as default and save the session.
  - 5) Click on the saved session to start the SSH connection. A window will prompt you for your username and password—use your usual EMSE credentials.
  - 6) Once connected, click on the **Start Menu** icon (bottom left), go to the **Other** section, and click on the **Thermo-Calc** icon. The software should launch.
  - 7) During the first use, Thermo-Calc will ask you to activate the license. Select **Online Activation Mode**, then enter:
    - **Login:** Lic-100117@thermocalc.com - **Password:** Please contact Quentin Gaillard or Julien Favre by e-mail to request this password. The cost of obtaining the password is a coffee and a croissant.FYI, this activation will generate a permanent key somewhere in your hidden files, eliminating the need to repeat this process for future uses.
  - 8) /!\ **Once finished, properly close the session!** Disconnect by clicking the **Start Menu → Logout**. In the popup window, click **Log out. Never shut down the PC**, as it would make it inaccessible to all users.
- 

Useful Commands:

- To check running processes, open a terminal and type:

```
```
top
```
```

Thermo-Calc appears under the name **java**.

- To terminate a running process, type:

```
```
kill -9 XXX
```
```

Replace **XXX** with the **PID number** from the first column of the `top` command.

---

**File Transfer:** To transfer files to/from the virtual machine, you can use **Filezilla**:

Install **Filezilla** on your host computer: [<https://filezilla-project.org>](<https://filezilla-project.org>).

Launch Filezilla and use the following settings:

1. **Host:** 193.49.173.62
  2. **Username & Password:** Your EMSE credentials
  3. **Port:** 22
- 

### Alternative Connection Method - SSH-X

- /!\ Whenever possible, prefer the previous method.

1) Install an SSH client, such as **Putty** ([[www.putty.org](http://www.putty.org)]([https://www.putty.org](http://www.putty.org))).

2) Open **Putty** and enter the following details:

1. **Host Name:** 193.49.173.62
2. **Port:** 22

3) In the left-side menu, expand **SSH** (click on the `+` sign) and select **X11**.

4) In the **X11** tab, check the box **Enable X11 forwarding**.

5) Return to the **Session** tab and click **Open**.

6) The session will start. Enter your credentials:

1. **Login as:** Your EMSE username
2. **Password:** Your EMSE password

7) In the terminal, type:

```
```
Thermo-Calc
```
```

and press **Enter**. Thermo-Calc should open with a graphical interface.

8) If your X2Go session is frozen, you can log in via a simple SSH terminal (without the X11 option) and use the following commands to close the stuck X2Go session:

1. View running processes:

```
```
top
```

Then, search for a process named x2gosession in the list and note its Process ID (PID).

1. Kill the X2Go session:

```
```
kill -9 XXX
```
```

(Replace **XXX** with the process ID from `top`.)

## Alternative file transfer method (SSH/Linux) - SSH-X/SSHFS

If you are connecting to the remote pc with **SSH**, you can 'mount' the remote pc's folders to your computer, and thus not need an **SSH** client.

- 1) Install **sshfs** via your package manager (ex: `apt install sshfs` on unbuntu)
- 2) Create a folder (directory) on **your** computer to act as a mount point (ex: `mkdir ~/thermocalc-remote`, meaning you create a directory called `thermocalc-remote` in your personnal folder)
- 3) Use the following command to mount the remote pc folder to the one you just created :

```
```
sshfs -o idmap=user <your EMSE id>@193.49.173.62:/home/local/EMSE2000/<your
EMSE id> ~/thermocalc-remote
```
```

to be sure about the right path on the remote server, when in ssh, you can type `pwd` which will show you the path to the current (remote) folder

- 4) \*Extra tip\* you can even create an alias in your (\*local\*) terminal to not have to type this big command : - Edit your (\*local\*) `~/.bashrc` file and add this at the end of the file (if I am M. Jean Bon, creating the alias `mountemse` or whichever name you choose) :

```
```
# Custom aliases
alias mountemse="sshfs -o idmap=user
jean.bon@193.49.173.62:/home/local/EMSE2000/jean.bon ~/thermocalc-remote"
```
```

- Then restart a terminal session so that the change can go into effect, and type the command `mountemse` and after a password prompt, you will mount your remote folder on the thermocalc pc on your local machine, so that you can access its content from your file manager seamlessly.

# Scripting with TC-Python :

---

Thermo-Calc can be used through a Python API, allowing for scripting and automated calculations: [TC-Python Documentation](<https://thermocalc.com/support/documentation/tc-python-help/>)

## Using TC-Python

To use TC-Python, you need to launch a Python IDE. The recommended IDE is **Spyder**, as it directly utilizes the libraries installed on the PC without requiring a virtual environment.

Click on the **Spyder** icon in the **Programming** section of the Start Menu.

## First-Time Setup

Once the IDE is launched, make sure to import the **tc\_python** library.

Additionally, for the first use, you must run the Python script located at: `` `/opt/Thermo-Calc/2025a/SDK/TC-Python/Examples/Miscellaneous/pyex\_M\_04\_license.py `` Executing this script will prompt you to enter your **username and password** (the same credentials as before). This process will generate a permanent key, stored in hidden folders, so you won't need to repeat this step in the future.

## Running Scripts with TC-Python

Once set up, you can develop or run scripts with **TC-Python**. Example scripts are available at: `` `/opt/Thermo-Calc/2025a/SDK/TC-Python/Examples/ ``

## Documentation

You can also access the official documentation at: `` `/opt/Thermo-Calc/2025a/Manuals/TC-Python/index.html ``

---

# Utilisation de l'API PyCharm :

---

!\\ Utilisation déconseillée...

A la première utilisation de PyCharm, il va falloir rentrer l'interpréteur python à utiliser.

Pour cela aller dans Settings > Python Interpreter. Dans le menu déroulant choisir "Show All" et cliquer sur "Add"

Sur la nouvelle fenêtre, à gauche, cliquer sur "System Interpreter" et vous pourrez choisir quelle version de Python utiliser (3.6 / 2.7 / autre ...).

Une fois l'interpréteur choisi, PyCharm va ajouter toutes les librairies installées. L'ensemble des librairies utilisables est indiqué dans Settings > Python Interpreter.

# Utilisation de la console de Thermocalc

Un calcul dans la console passe par plusieurs étapes (modules) :

- 1) Module DATABASE : c'est ici qu'il faut choisir la base de donnée à utiliser, les éléments à considérer pour le calcul ou éventuellement ajouter ou enlever des phases.
- 2) Module POLY-3 : c'est ici qu'il faut renseigner les détails du calcul à faire. Conditions initiales / Type de traitement à faire (single point / 1D / diagramme de phase...). Quand toutes les conditions sont bonnes il faut lancer le calcul.
- 3) Module POST : c'est le post traitement du calcul. Tout ce qui concerne affichage des résultats sur la partie graphique ou récupérer les résultats sous forme d'image, de fichier txt ou autre.

**Des exemples de calcul peuvent être trouvé dans le dossier de Thermocalc : /opt/Thermo-Calc/2021a/Examples/Console-Mode/Thermo-Calc**

Les commandes de base de la console de Thermocalc :

```
# Commandes générales
go [module]                                     #change de module
help [fonction]                                  #aide sur la fonction
?  #donne de l'aide sur les différents choix possibles
pour répondre à une question
*  #tous les éléments ou toutes les phases
.  #dérivée

# Module DATABASE
sw      (switch)          #change de bases de données
def-sys [composants]    (define-system)        #définit le système
get           #charge les fonctions thermodynamiques du système
défini
l-syst [argument]   (list-system)       #liste les phases du système défini
rej [argument]     (reject)           #rejette phases (ph) ou permet de
réinitialiser le système (sys)

# Module POLY-3
s-c [conditions]   (set-conditions)    #fixe des conditions pour le
calcul
l-c      (list-conditions)    #liste les conditions
c-e      (compute-equilibrium)        #effectue le calcul
d'équilibre dans les conditions données
l-e      (list-equilibrium)         #liste le résultat du calcul
d'équilibre
ent-sym f      (enter-symbol function) #définit une fonction
ch-st ph [phase]=[statut]  (change-status phase)      #change le
```

```

statut d'une ou plusieurs phases (entered ou suspended)
s-a-v [n°][variable][limite]      (set-axis-variable)          #définit un axe
de variable
step [option]                      #calcule selon un axe variable (NORMAL:
calcul phases stables, SEPARATE: calcul de chaque phase séparément)
map                                #calcule selon deux axes
save                               #vide la mémoire et efface le contenu des
calculs précédents
po       (post)                   #va au sous-module graphique

# Sous-module POST (sous-module de POLY-3)
s-d-a      (set-diagram-axis)    #définit les axes du tracé
s-s-s      (set-scaling status) #définit les limites du tracé
s-l       (set-label)           #met des label sur les courbes
s-d-ty     (set-diagram type)   #passe en diagramme triangulaire
s-t-s 1    (set-tieline-status) #trace les conodes
pl        (plot)              #trace le diagramme
ba        (back)               #retourne dans POLY-3

# Fonctions thermodynamiques
# H, S, G sont l'enthalpie, l'entropie et l'énergie de Gibbs. Si rien n'est
spécifié, ce sont les grandeurs pour le système. On utilise généralement les
grandes molaires en rajoutant M comme suffixe. On peut ensuite préciser si
on souhaite pour une phase donnée. Par exemple :
# GM(bcc) : énergie de Gibbs molaire de la phase bcc
# HM(*) : enthalpie molaire de toutes les phases

# Some of the state variables that can be used in conditions are:
T      temperature in the system
P      pressure in the system
N      total system size (in moles)
B      total system site (in grams)
N(<component>) mole number of a component in the system
X(<component>) mole fraction of a component in the system
B(<component>) mass (grams) of a component in the system
W(<component>) mass fraction of a component in the system
ACR(<component>) activity of a component in the system
MUR(<component>) chemical potential of a component in the system
N(<phase>,<component>) mole number of a component in a phase
X(<phase>,<component>) mole fraction of a component in a phase
B(<phase>,<component>) mass (grams) of a component in a phase
W(<phase>,<component>) mass fraction of a component in a phase
ACR(<phase>,<component>) activity of a component in a phase
MUR(<phase>,<component>) chemical potential of a component in a phase
H      enthalpy in the whole system
HM(<phase>) enthalpy of a phase (per mole)

```

**Tracer un pseudo-binaire tout en gardant l'alliage initial identique :**

Exemple : ajout de Ni dans un alliage Fe50Cr50 où on veut garder la proportion Fe/Cr constante.

```

go da                      #on rentre dans le module DATABASE
sw TCFE9                   #on veut travailler avec la base de donnée TCFE9
def-sys fe ni cr           #définition des éléments à utiliser
get                         #chargement de ces conditions

go pol                      #on rentre dans le module POLY-3
s-c n=1 p=1e5 T=1000 N(ni)=0.5 N(fe)-N(cr)=0 #on donne nos conditions :
n=1mol / T=1000K / P=1e5 Pa / Quantité de Ni au départ / Condition sur Fe et
Cr pour garder Fe/Cr constant
l-c                         #affiche nos conditions pour vérifier que l'on a
bien le bon nombre de degré de liberté
c-e                         #calcule l'équilibre au point de départ défini
par s-c
l-e,,,                      #affiche l'équilibre au point de départ
(activité / phases / compositions)

s-a-v 1 N(ni) 0 1,,,       #définition du 1er axe de variation. Ici on veut
un diagramme de phase donc 2 données à faire varier : N(Ni) et T
s-a-v 2 T 400 1600,,,     #définition du 2e axe de variation
map                         #lancement du calcul qui prendra en compte les 2
axes définis.

post                        #on rentre dans le module POST
plot                         #on demande d'afficher le résultats. Par défaut
il affiche les 2 axes de variable ici T en fonction de N(Ni) soit le
diagramme de phase. Possibilité de changer l'affichage avec la commande s-d-
a

```

From:

<https://portail.emse.fr/dokuwiki/> - **DOC**

Permanent link:

<https://portail.emse.fr/dokuwiki/doku.php?id=recherche:softs:thermocalc>

Last update: **19/06/2025 17:13**

