

Connection to the Thermo-Calc PC using X2Go:

- 1) Install the X2Go Client software on your computer: available at 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:** LXDE
 - 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:** This password can be requested via email from **Quentin Gaillard** or **Julien Favre**.
- FYI, this activation will generate a permanent key somewhere in your “home folder,” eliminating the need to repeat this process for future uses.
- 8) **/!\ Once finished, properly close Thermo-Calc!** 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>.

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](<https://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`.)

## Utilisation de TC-Python :

---

Thermocalc peut être utilisé à travers un API Python, permettant de faire des scripts et des calculs automatiques : <https://www2.thermocalc.com/downloads/support/python/python/index.html>

Pour utiliser TC-Python, il faut lancer un IDE Python. Deux IDE sont disponibles: Spyder, et PyCharm. Pour lancer Spyder, taper la commande "spyder3" dans une console. Pour lancer PyCharm, cliquer sur l'icone Pycharm dans la section "Programmation" du menu démarrer, ou bien exécuter la commande "/opt/pycharm-community-2020.1/bin/pycharm.sh"

Une fois l'IDE lancé, il faut importer tc\_python, et bien rajouter des lignes de commande spécifiques à Linux, servant à rajouter les variables d'environnement manquantes dans l'environnement Python. Donc bien mettre ceci dans votre script:

```
import os
del os.environ['SSH_CONNECTION']
os.environ["PATH"]+=":/opt/Thermo-Calc/2020b"
os.environ["PATH"]+=":/opt/Thermo-Calc/2020b/SDK/TCAPI"
os.environ["PATH"]+=":/opt/Thermo-Calc/2020b/SDK/TQ"
os.environ["TC20B_HOME"]="/opt/Thermo-Calc/2020b"
os.environ["LSHOST"]="NO-NET"
os.environ["LSERVRC"]="/opt/Thermo-Calc/lserverc"
from tc_python import *
```

Pour l'utilisation de TC-Python, se référer aux exemples qui sont disponibles dans le dossier /opt/Thermo-Calc/2020a/SDK/TC-Python/Examples, ainsi que sur l'aide en ligne et sur la documentation Thermo-Calc.

---

## 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 part 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
grandeurs 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

```

### 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&rev=1738164066>

Last update: 29/01/2025 16:21

