

## 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:** 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>](<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>)).

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`.)

---

## 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
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=1738164799>

Last update: 29/01/2025 16:33

