

Créer un vidéo d'une simulation LAMMPS avec Ovito et Adobe Premiere Pro

Par Antoine Rinent, 2019

Il est intéressant de parfois faire un vidéo d'une simulation LAMMPS, autant comme « proof of concept » que pour comprendre comment se comporte une simulation. Le tout se fait en trois étapes, la création d'un fichier « dump », la lecture de ce dernier, et la création du vidéo.

Création d'un fichier dump avec LAMMPS

Pour créer un fichier dump, il existe plusieurs méthodes, qui sont décrites dans [la documentation de LAMMPS](#). Personnellement, je trouve les fichiers xyz comme étant une bonne façon de procéder, pour une simulation ne comportant qu'un type d'atomes, par exemple une maille d'aluminium pur parfaite. Voici un exemple d'appel de la fonction dump :

```
dump mydump all xyz 200000 EffetNb.xyz
```

Celle-ci va créer un fichier xyz nommé EffetNb.xyz de tous les atomes à chaque 200000 itérations de la simulation. Le nom mydump ne sert qu'à faire référence à ce « dump », mais les applications sont ici très limitées.

Je recommande de mettre un nombre d'itérations à peu près équivalent au nombre total d'itérations divisé par une valeur entre 300 et 600. La logique est qu'un vidéo est d'aux alentours de 30 images par seconde, et pour bien voir les changements, le vidéo devrait durer entre 10 et 20 secondes. Bien entendu, il vaut mieux trouver un nombre d'itérations permettant de voir l'état initial et l'état final (c'est-à-dire avoir un nombre d'images entre 300 et 600), plutôt qu'avoir un nombre d'exactement 300 images, mais des divisions moins aisées dans la simulation.

De plus, en utilisant une division plus simple des images dans LAMMPS, ceci facilite le diagnostic de problèmes présents dans la simulation, car il sera plus facile de visualiser mentalement à quel moment de la simulation on se retrouve en observant le fichier dump à partir d'Ovito.

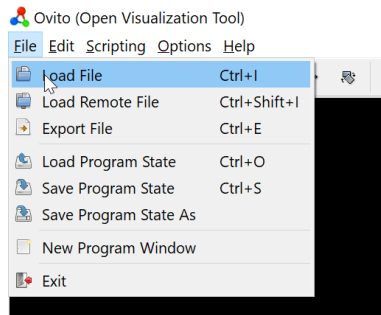
Il est important de noter que ces fichiers, surtout pour les systèmes comportant un nombre important d'atomes, sont très volumineux. Ceux-ci sont créés en comportant une ligne par atome par « image ».

Visualisation du fichier dump dans un logiciel spécialisé

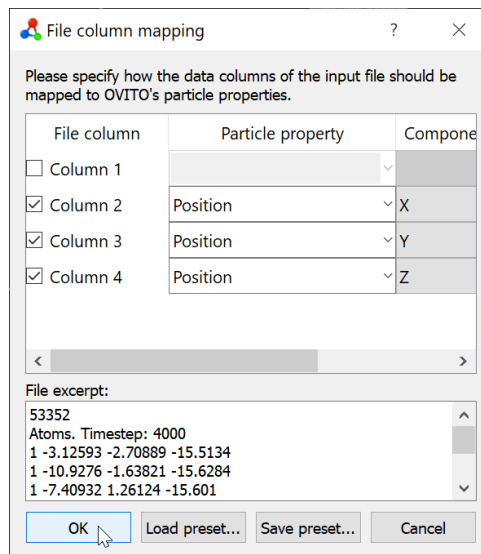
Un logiciel très simple à utiliser à ces fins, qui existe depuis longtemps est VMD. Cependant, son interface est plutôt lente et assez laide, raison pour laquelle ce guide recommande l'utilisation d'Ovito. [Il est possible de retrouver le bon exécutable de téléchargement sur leur site web](#). L'installation, contrairement à VMD, est très rapide et simple, raison pour laquelle elle ne sera pas décrite dans le présent document.

Ouverture du fichier dump dans Ovito

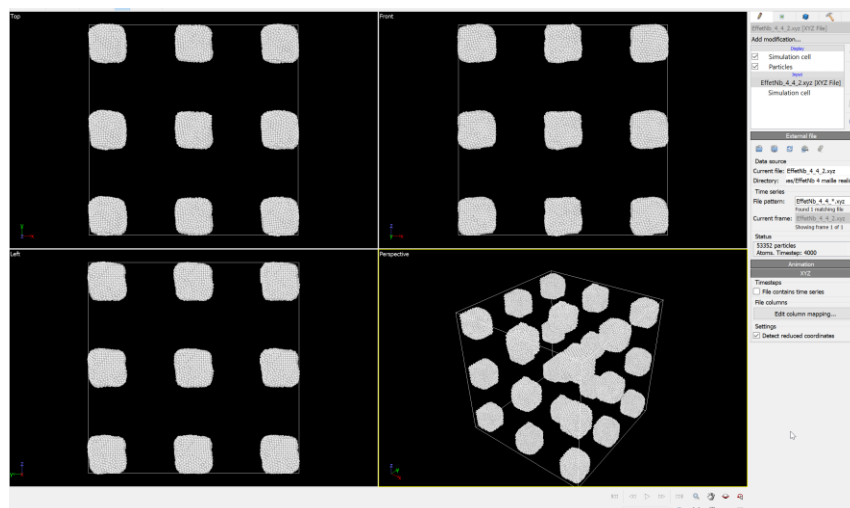
Sélectionnez load file dans le menu File :



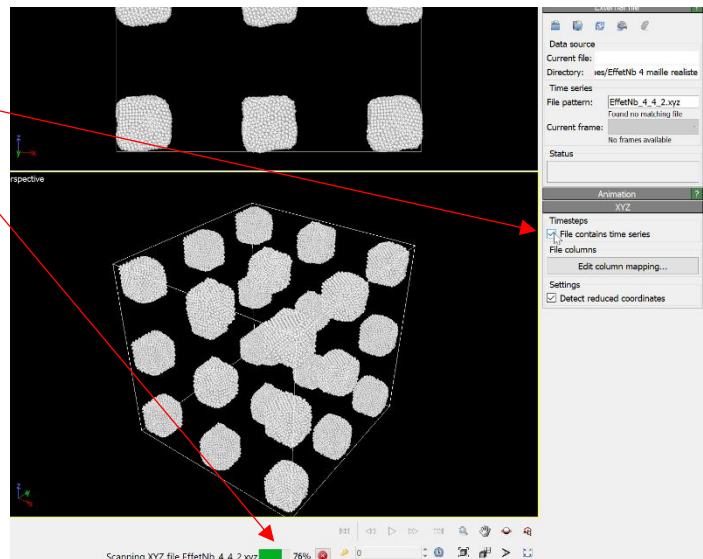
Il faut ensuite expliquer à Ovito comment lire le fichier dump que vous fournissez, dans le cas d'un fichier .xyz pour une maille pure (un seul type d'atomes), cette configuration convient :



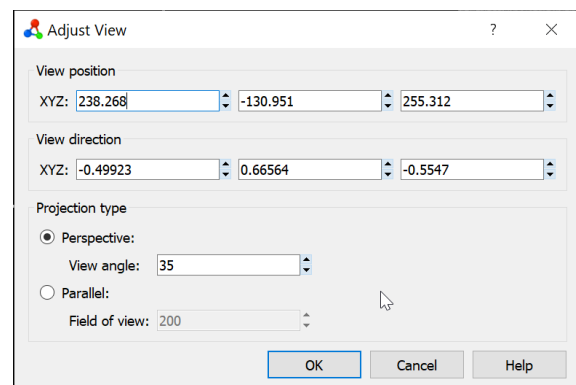
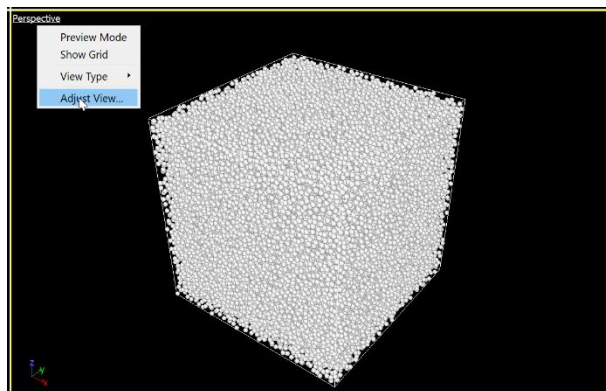
En sélectionnant « OK » vous verrez dans la fenêtre d'Ovito les différents points de vue de la première image de votre simulation :



Afin de rendre clair à Ovito que votre document .xyz comprends plusieurs images, il faut sélectionner l'option « File contains time series ». Il y aura un léger délai d'attente pendant que le logiciel lira le document entier pour les différentes « images ». Par après vous noterez que le bas de la fenêtre sert de « slider » pour sélectionner l'image à visualiser.



Avant de lancer le « rendering » des images, assurez-vous que la simulation dans la fenêtre « Perspective » vous convient. Celle-ci peut être ajustée manuellement avec la molette de la souris et en faisant des click and drag dans la fenêtre. Cependant, je recommande fortement de noter les paramètres sélectionnés, car le défaut d'Ovito est sa stabilité lors du rendering d'images, ou du moins le manque de stabilité. Pour se faire, il suffit d'ouvrir la fenêtre en question :



À partir d'ici, il est possible de visualiser la simulation à partir de l'interface utilisateur d'Ovito, si le tout convient, il s'agit alors de paramétrer le rendering.

Paramétrer la création des images de la simulation

À droite se retrouvent les paramètres que j'aime bien sélectionner. En voici l'ordre :

1. Choisir l'onglet approprié
2. Sélectionner l'animation complète
3. Sélectionner la résolution des images
4. Sélectionner où sauvegarder les images
5. Sélectionner la couleur de l'arrière-plan
6. Sélectionner la méthode de création d'images (bouton Switch render)

La résolution 1600x1200 (disponible dans les presets) est un bon compromis entre performance et image de haute qualité.

En sélectionnant l'endroit où enregistrer les images, gardez en tête que les images seront nombreuses, donc sélectionnez un dossier spécialement conçu à cet effet. Le nom des images sera la concaténation du nom que vous inscrivez dans le menu contextuel et le numéro de l'image, par exemple : Ovito152.png.

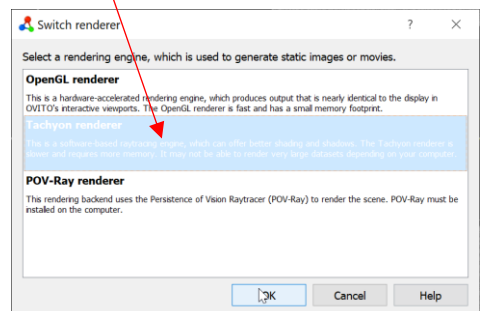
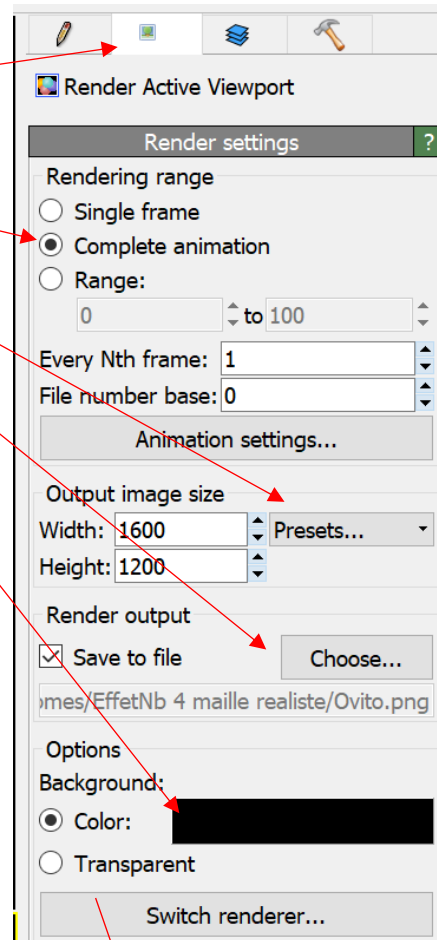
Utiliser un fond noir est un classique, et permet d'augmenter la visibilité de la maille créée dans LAMMPS, par défaut le fond est transparent, ce que je ne recommande pas, car ceci causera des incohérences dans la lecture du fichier vidéo créé en fonction du lecteur sélectionné.

En ce qui concerne le renderer sélectionné, ceci dépend de votre ordinateur, ainsi que de l'effort que vous voulez mettre dans la création du film. Ovito explique bien (voir fenêtre plus haut) les différences entre les renderers proposés, mais je vais y rajouter ma touche personnelle afin de vous faciliter le choix du renderer.

POV-Ray ne serait à utiliser que si vous ne comptez pas utiliser votre ordinateur lors de la création des images. [Il faut télécharger l'exécutable POV-Ray à partir de leur site web](#). Il crée de belles images, avec beaucoup d'options, cependant, pour chaque image le logiciel POV-Ray va s'ouvrir, générer l'image, puis se fermer. Suite à quoi Ovito va charger l'image suivante, rouvrir POV-Ray, etc. ce qui va rendre votre ordinateur inutilisable en raison du nombre important de fenêtres qui vont s'ouvrir et se fermer.

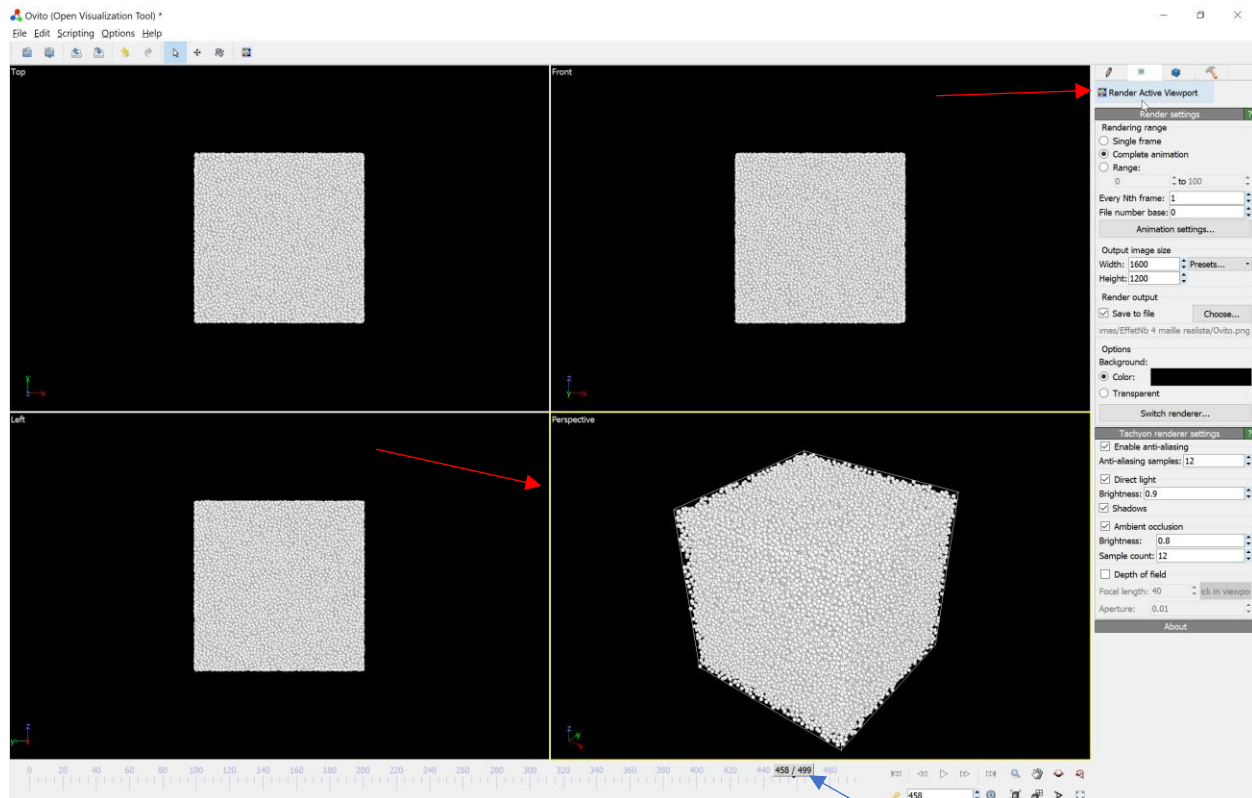
En ce qui concerne les choix entre OpenGL et Tachyon, tout dépend de votre ordinateur. Si votre ordinateur n'est pas très puissant, optez pour OpenGL, sinon, je recommande Tachyon, qui offre la possibilité d'inclure des ombres, rendant le produit final beaucoup plus beau et professionnel. Le compromis réside dans le temps de calcul important pour Tachyon puisqu'il n'est pas accéléré par une carte graphique par exemple.

Une fois le renderer sélectionné, il s'agit de le paramétrer à vos besoins, en fonction des options qui sont offertes. Celle la plus de base consiste en l'ajout d'antialiasing, que je recommande fortement pour un



résultat plus beau (en gardant en tête qu'un nombre plus élevé sera plus demandant). Ceci consiste en un floutage léger des bordures pour éviter d'avoir un effet d'escalier causé par les pixels de l'image. Le résultat est qu'en observant l'image entière, on remarque un résultat beaucoup plus naturel. Plus bas se retrouve un exemple de l'application de l'antialiasing. En règle générale, les paramètres par défaut de chaque renderer sont un bon compromis entre performances et résultat final.

Il faut ensuite cliquer sur le bouton « Render Active Viewport » en vous assurant que le Viewport de votre intérêt est sélectionné dans la fenêtre (dénotté par un cadre jaune) :



Il s'agit ensuite de laisser Ovito terminer la création de toutes les images. Dans l'éventualité où ce dernier plante lors de la création de celles-ci, il est possible de recommencer en sélectionnant la fenêtre voulue et en y mettant les mêmes paramètres qu'auparavant (raison pour laquelle j'ai recommandé de les noter). Regardez dans le dossier des images jusqu'à quelle image Ovito a produit des images, par exemple en plantant à Ovito123.png (étant la dernière image créée dans le répertoire).

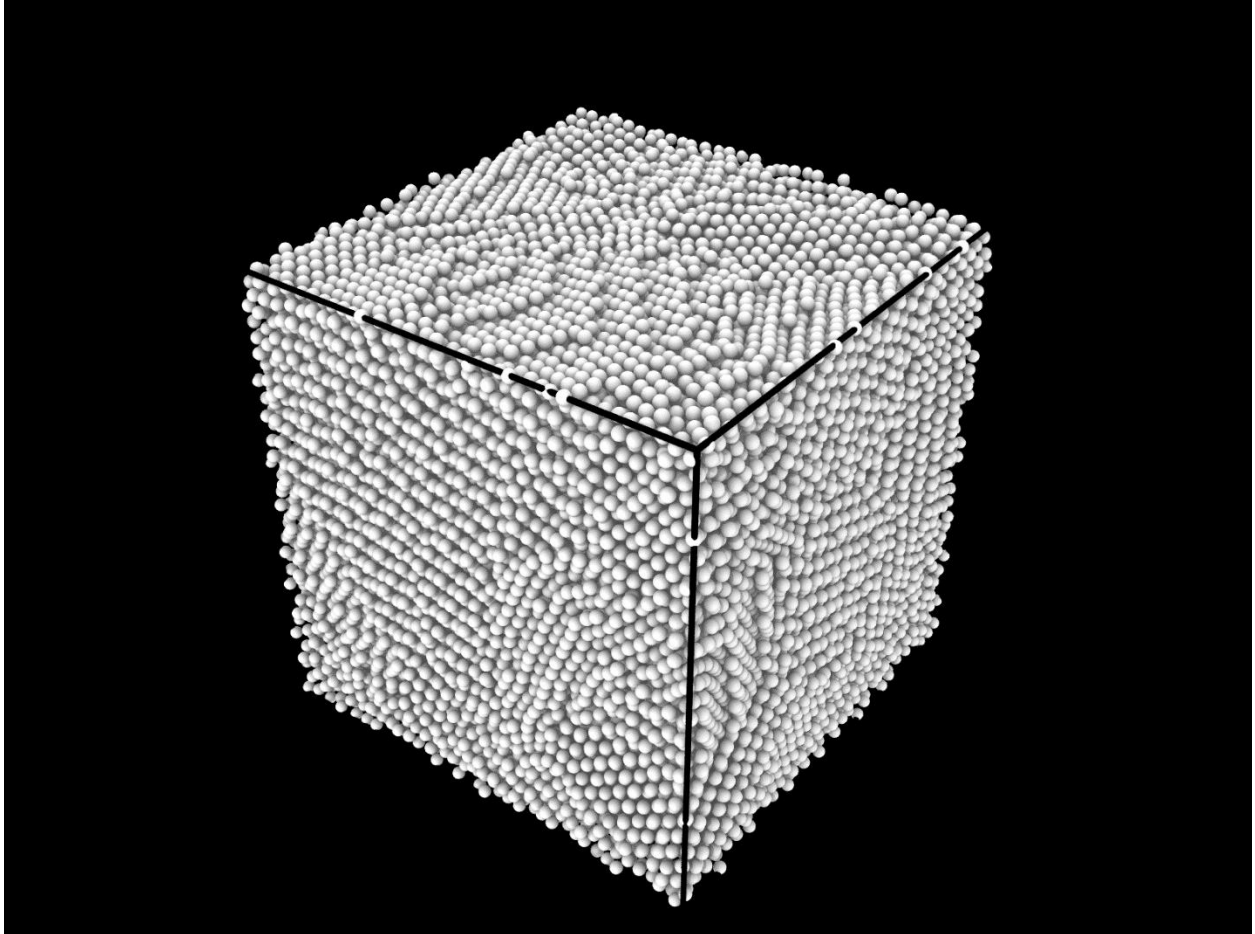
Paramétrez le renderer comme auparavant, mais au lieu de choisir « Complete animation », sélectionnez « Range ». Comme valeur finale mettez la valeur maximale (flèche bleue plus haut), comme valeur initiale mettez le numéro supérieur à la dernière image imprimée, 123 dans cet exemple, résultant en Range : 124 to 499. Ceci est parce qu'Ovito, comme tout langage de programmation qui se respecte, entame l'indexation à 0.

Une fois toutes les images créées il s'agit de s'en servir pour créer un vidéo.

Création d'un vidéo à partir de Premiere Pro

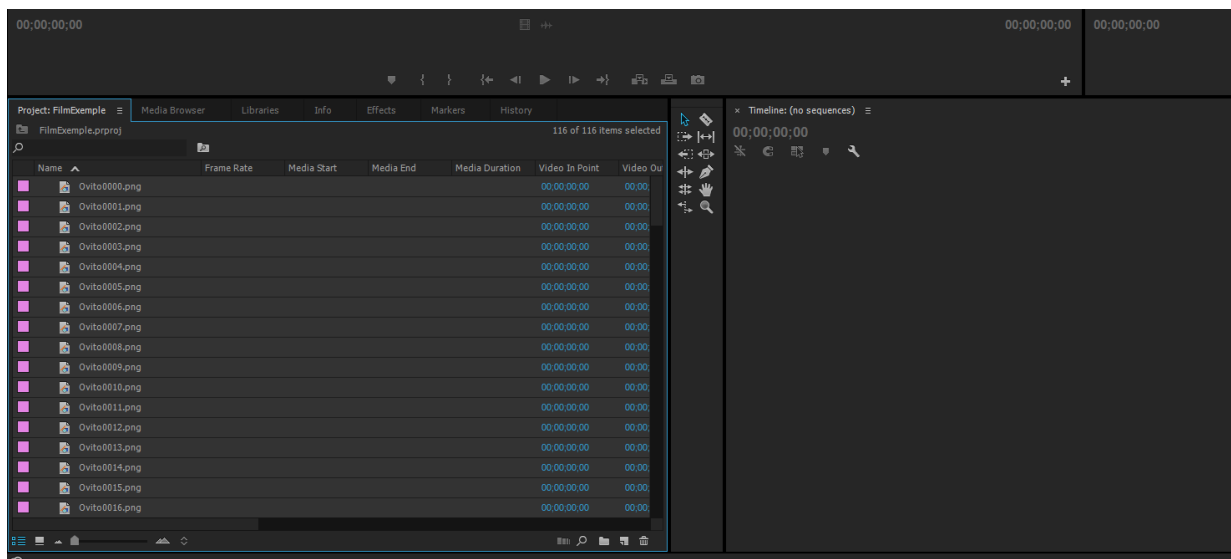
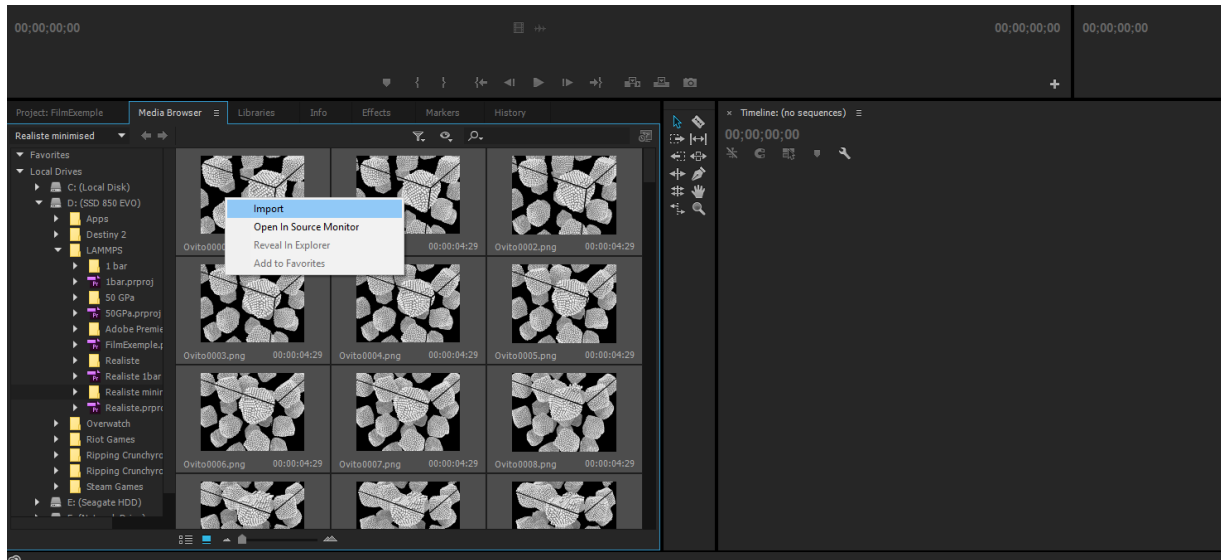
Je recommande l'utilisation de Premiere Pro, car c'est un logiciel très puissant et relativement populaire, ce qui le rend aisé à obtenir par différents moyens. Je n'ai pas trouvé de nombreux logiciels qui permettent de créer un vidéo à partir de plusieurs images, à la façon d'un stop motion. Celui recommandé par VMD est VideoMach, qui est fonctionnel, mais à mon avis peu recommandable. En effet, ce dernier va compresser les images dans la création du vidéo, résultant en une perte de résolution du produit final, ce qui est plutôt dommage.

Vous devriez en théorie avoir plusieurs images comme celle-ci :

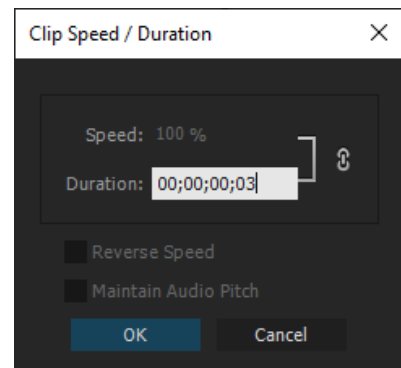


Commencez par créer un nouveau projet dans Premiere Pro et nommez-le comme vous le voulez.

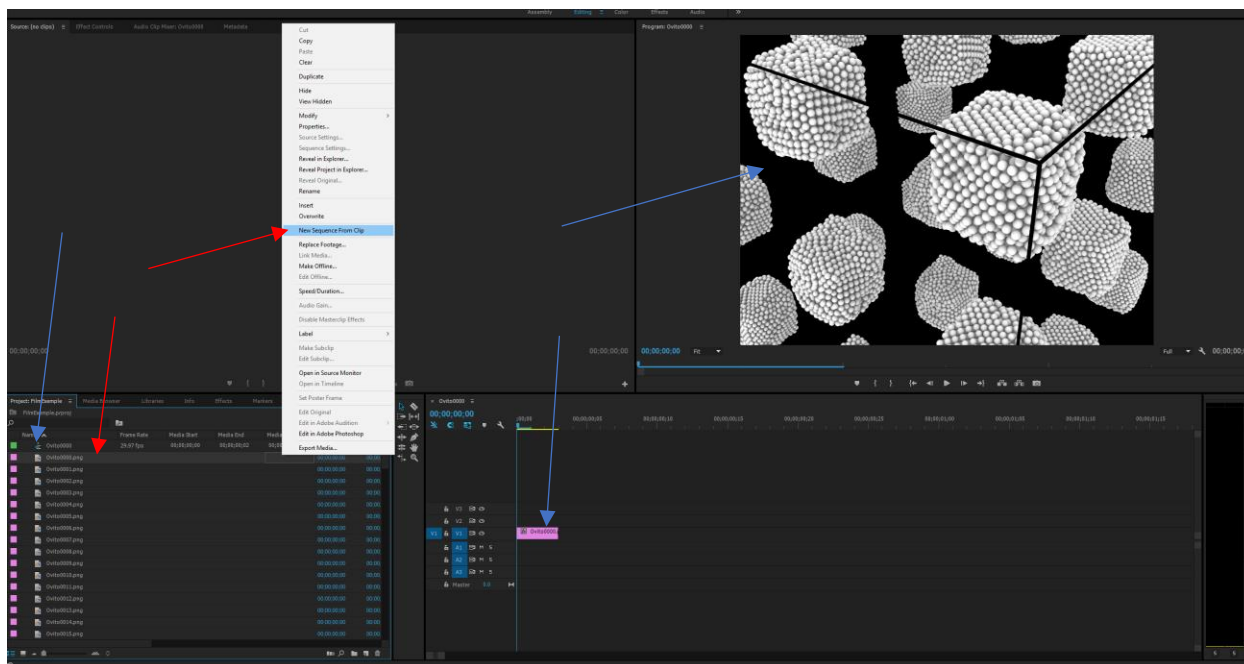
À partir de la fenêtre « Media Browser » trouvez le dossier dans lequel résident les images que vous avez créées avec Ovito et sélectionnez-en une. De là faites le raccourci clavier ctrl + i pour toutes les sélectionner, suivi d'un clic droit puis « import ». Vous devriez retrouver les images dans les fichiers du projet :



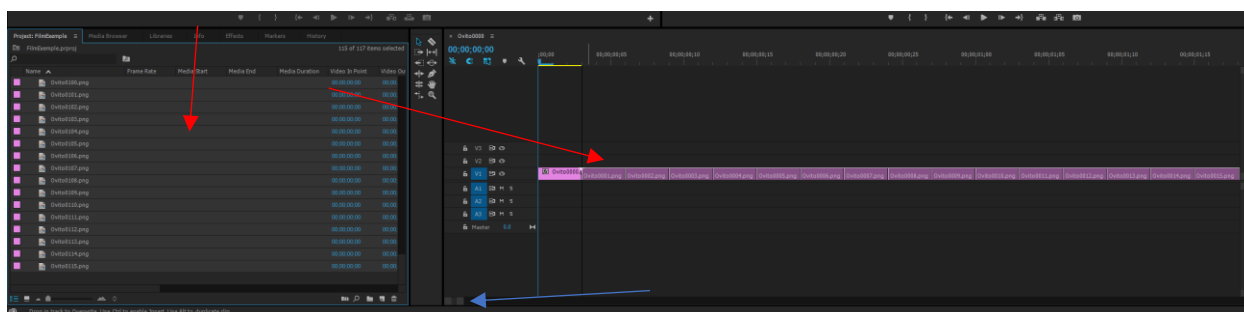
Sélectionnez toutes les images comme auparavant, suivi d'un clic droit puis de « Speed/Duration ... ». Je recommande de mettre une durée entre 4 et 2 centièmes de seconde, en fonction d'à quel point vous désirez que votre film soit lent ou rapide, 3 centièmes de seconde est un bon compromis.



Il est ensuite important de ne choisir que la première image, suivi d'un clic droit -> « New sequence from clip » (voir flèches rouges). Ceci devrait créer une image et mettre la première image dans la timeline, ainsi qu'un clip dans l'explorateur de fichiers importés (voir flèches bleues).



Il faut ensuite sélectionner toutes les images, en ordre, excluant la première. Pour se faire, sélectionnez la seconde, descendez tout en bas de la liste, puis en gardant la touche Shift enfoncée, sélectionnez la dernière. Le tout suivi d'un click and drag du tout vers la timeline, en les mettant à la suite de la première image. Si celle-ci n'est pas facile à voir sur la timeline, réduisez la taille de la barre de navigation horizontale de celle-ci afin de bien la voir (voir flèche bleue).



Il est maintenant possible de voir votre film en cliquant sur le bouton play du visualisateur en haut à droite de la fenêtre. Si le tout vous convient, il suffit ensuite d'exporter le tout.

Pour l'exportation il suffit d'ouvrir le menu d'exportation de médias dans File -> Export -> Media...

Les paramètres de base sont satisfaisants, je recommande d'assurer avoir un format H.264 avec un haut bitrate pour ne pas perdre de qualité (en raison de la nature légère des images, ceci n'augmentera pas virtuellement la lourdeur du fichier vidéo)

Renommez le vidéo comme vous le voulez, puis envoyez l'exportation! En fonction de la puissance de votre ordinateur, ceci peut prendre un temps variable, mais ne devrait pas être abusif puisqu'il s'agit d'un projet relativement simple, surtout pour Premiere Pro.

