

ocp-models導入マニュアル

2023/1/13

Masaki Open Lab

手順概要

- 必要なソフトウェアの事前インストール
 - Visual Studio
 - Git
- 環境構築
 - GPU環境の場合
 - CPU環境の場合

Visual Studio

[Visual Studio Tools のダウンロード - Windows、Mac、Linux 用の無料インストール \(microsoft.com\)](https://visualstudio.microsoft.com/ja-downloads/)

ダウンロード



Visual Studio 2022



Windows の .NET および C++ 開発者用の包括的で最高の IDE です。ソフトウェア開発のあらゆるステージを向上させるためのツールと機能が満載です。

[リリースノート](#) > [エディションの比較](#) > [オフラインでインストールする方法](#) >

コミュニティ

強力な IDE、学生、オープンソース貢献者、個人に無料

[無料ダウンロード](#)

Professional

小規模なチームに最適な Professional IDE

[無料試用版](#)

Enterprise

あらゆる規模のチーム向けのスケーラブルなエンドツーエンドソリューション

[無料試用版](#)

プレビュー


メイン リリースにまだ含まれていない最新の機能にいち早くアクセスできます

[詳細情報](#) > [リリースノート](#) >

- ・ダウンロード後、C++を利用したデスクトップ開発に必要なものをインストール

Git

[Git - Downloads \(git-scm.com\)](https://git-scm.com)




 **git** --distributed-even-if-your-workflow-isnt

Search entire site...


About
Documentation
Downloads
GUI Clients
Logos
Community

The entire **Pro Git book** written by Scott Chacon and Ben Straub is available to [read online for free](#). Dead tree versions are available on [Amazon.com](#).

Downloads

 [macOS](#)  [Windows](#)
 [Linux/Unix](#)

Latest source Release
2.39.0
[Release Notes \(2022-12-12\)](#)
[Download for Windows](#)



Older releases are available and the [Git source repository](#) is on GitHub.

GUI Clients

Git comes with built-in GUI tools (**git-gui**, **gitk**), but there are several third-party tools for users looking for a platform-specific experience.

[View GUI Clients →](#)

Logos

Various Git logos in PNG (bitmap) and EPS (vector) formats are available for use in online and print projects.

[View Logos →](#)

Git via Git

If you already have Git installed, you can get the latest development version via Git itself:

```
git clone https://github.com/git/git
```

You can also always browse the current contents of the git repository using the [web interface](#).

環境構築-GPU環境の場合

[Open Catalyst Project](https://nanolabo-doc.readthedocs.io)汎用力場を使うための設定 — Advance/NanoLabo ドキュメント (nanolabo-doc.readthedocs.io)

3. ocp-modelsリポジトリの用意

gitコマンドが使える場合は

```
git clone https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp.git
```

または <https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp/archive/refs/heads/master.zip> をダウンロード・解凍します。

Ampere世代GPUを使う場合は `env.gpu.yml` を開き、次の2行を変更してください。

変更前

```
- cudatoolkit=10.2  
- -f https://pytorch-geometric.com/whl/torch-1.9.0+cu102.html
```

変更後

```
- cudatoolkit=11.1  
- -f https://pytorch-geometric.com/whl/torch-1.9.0+cu111.html
```

- Anaconda Prompt上でgit cloneを実施→user直下にocpフォルダができる
 - `env.gpu.yml`をテキストで開き、111もしくは11.1となっている部分を102もしくは10.2に変更
- ※web上の説明文と逆が正しいです。最近、Ampere世代を前提としたymlにかわったようです。

環境構築-GPU環境の場合（つづき）

4. インストール

リポジトリのフォルダに移動し、

```
pip install conda-merge
```

を実行します。次に、ocp-models仮想環境を作成します。

CPUで計算を行う（GPUを使わない）場合

```
conda-merge env.common.yml env.cpu.yml > env.yml  
conda env create -f env.yml  
conda activate ocp-models
```

GPUで計算を行う場合

```
conda-merge env.common.yml env.gpu.yml > env.yml  
conda env create -f env.yml  
conda activate ocp-models
```

最後に

```
pip install -e .
```

を実行してリポジトリの内容をパッケージとしてインストールします。

- Anaconda Promptを開き、cd ocpとしてocpフォルダに移動
- 上記スクリプトを順に実施（GPUで計算を行う場合のケース）

環境構築-CPU環境の場合

3. ocp-modelsリポジトリの用意

gitコマンドが使える場合は

```
git clone https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp.git
```

または <https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp/archive/refs/heads/master.zip> をダウンロード・解凍します。

4. インストール

リポジトリのフォルダに移動し、

```
pip install conda-merge
```

を実行します。次に、ocp-models仮想環境を作成します。

CPUで計算を行う（GPUを使わない）場合

```
conda-merge env.common.yml env.cpu.yml > env.yml  
conda env create -f env.yml  
conda activate ocp-models
```

最後に

```
pip install -e .
```

を実行してリポジトリの内容をパッケージとしてインストールします。

その他

- 実際に使用する際は、以下をAnaconda promptで実行
 - `cd ocp`
 - `conda activate ocp-models`
 - （初回のみ）`pip install jupyter notebook`
 - 以下、仮想環境上でjupyter notebookを起動