# ocp-models導入マニュアル

2023/1/13

Masaki Open Lab

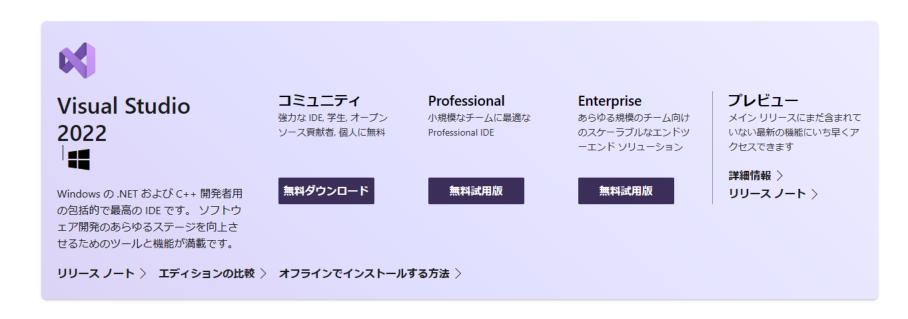
### 手順概要

- 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

<u>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)</u>

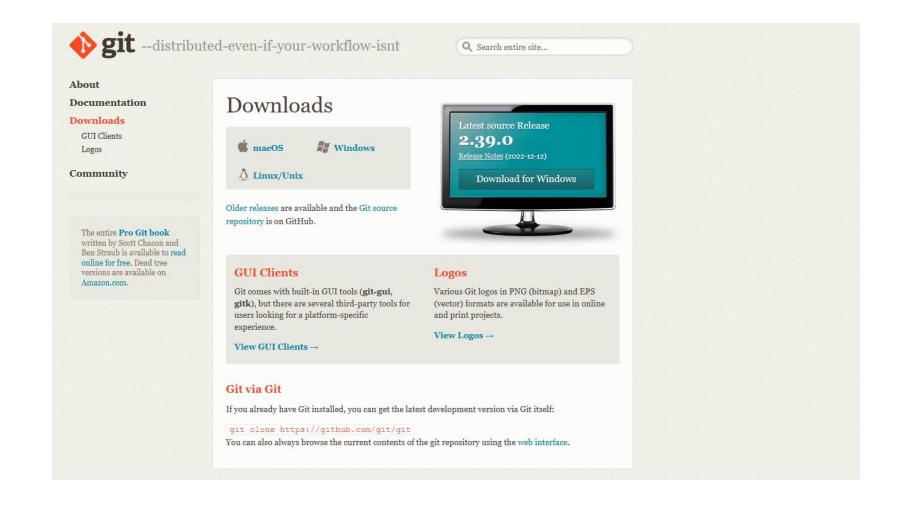
### ダウンロード



・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)



### 環境構築-GPU環境の場合

Open Catalyst Project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 <a href="https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp/archive/refs/heads/master.zip">https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp/archive/refs/heads/master.zip</a> 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 <a href="https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp/archive/refs/heads/master.zip">https://github.com/Open-Catalyst-Project/ocp/archive/refs/heads/master.zip</a> 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