

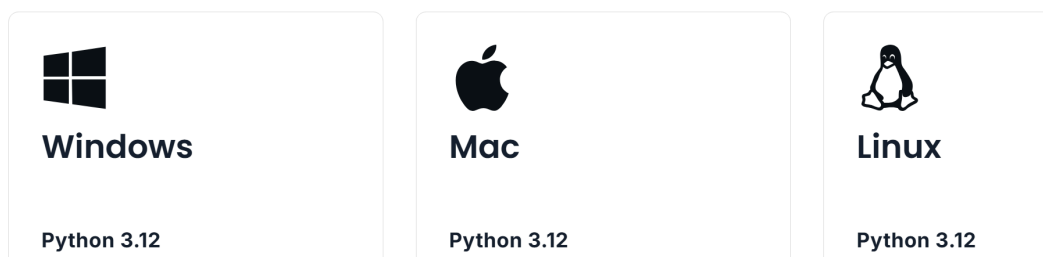
# Python工作环境安装

## 工作环境安装流程

注意：本教程仅针对Windows电脑，对于其他系统，请自行Google怎么安装

先下载并安装anaconda：<https://www.anaconda.com/download/success> (建议安装miniconda，文件小一些，功能一样，只不过没有一些基础包，课程中也用不上)

### Miniconda Installers



安装后打开anaconda prompt（请在安装后，在开始栏里面搜索 Anaconda Prompt），后面安装包的操作请在命令行里面进行。

```
Anaconda Prompt
(base) C:\Users\moyim>conda env list

# conda environments:
#
base             * C:\Users\moyim\miniconda3
aidrug           C:\Users\moyim\miniconda3\envs\aidrug

(base) C:\Users\moyim>
```

- 1 # 先在conda中创立一个新的环境（用于方便管理，以免因为装了特定的包导致其它包不能用）
- 2 `conda create --name aidrug python=3.11`
- 3 # 激活环境
- 4 `conda activate aidrug`
- 5 # 安装化学信息学包
- 6 `pip install rdkit`
- 7 # 安装一些常用的包
- 8 `pip install numpy pandas matplotlib scikit-learn tqdm openpyxl`

```
9 # 安装jupyterlab
10 pip install jupyterlab ipywidgets jupyterlab_widgets
11 # 安装变量查看器 https://github.com/jupyterlab-contrib/jupyterlab-
    variableInspector
12 pip install lckr_jupyterlab_variableinspector
13 # 安装pytorch CPU version
14 pip install torch==2.6.0
15 # 课程比赛需要的包
16 pip install pymodbus[serial] opencv-python torchvision
17
18 # 进入jupyterlab的界面，会自动跳出网页
19 jupyter lab
```

## 编程界面IDE

针对本课程而言jupyter lab是完全够用的，但jupyter lab对于debug而言不是特别友好，新手可以考虑使用：spyder和pycharm，spyder应该是新手最友好的，pycharm功能强大一些，有一系列代码补齐等功能。

spyder: <https://www.spyder-ide.org/> （最像matlab的，最推荐使用）

pycharm: <https://www.jetbrains.com/pycharm/>

更进阶的可以用考虑VS Code，但这个就需要安装不少插件，自行调研使用：

VS Code: <https://code.visualstudio.com/>

## conda环境管理的基本知识

以下是 `conda` 环境的创建、管理和删除的基本操作代码总结：

### 1. 创建环境

创建一个新的环境，可以指定 Python 版本或其他包：

```
1 conda create --name myenv python=3.8
2 # myenv是自定义的名字
```

### 2. 激活环境

激活你刚创建的环境：

```
1 conda activate myenv
```

### 3. 列出所有环境

查看你所有的 conda 环境：

```
1 conda env list
```

### 4. 安装包

在当前激活的环境中安装包：

```
1 conda install package_name
```

### 5. 查看已安装的包

查看当前环境中已安装的包：

```
1 conda list
```

### 6. 更新包

更新某个包到最新版本：

```
1 conda update package_name
```

### 7. 删除包

从当前环境中删除包：

```
1 conda remove package_name
```

## 8. 复制环境

复制一个环境：

```
1 conda create --name newenv --clone myenv
```

## 9. 导出环境

导出当前环境的配置，生成一个 `environment.yml` 文件：

```
1 conda env export > environment.yml
```

## 10. 从文件创建环境

根据 `environment.yml` 文件创建环境：

```
1 conda env create -f environment.yml
```

## 11. 删除环境

删除一个环境：

```
1 conda remove --name myenv --all
```

## 12. 退出环境

退出当前环境：

```
1 conda deactivate
```