

步骤 1: 确认你的 GPU 是否支持 CUDA

运行 `nvidia-smi` 命令 (需要安装 NVIDIA 驱动):

- **`nvidia-smi`**

这会显示你的 GPU 及支持的 CUDA 版本。

`nvidia-smi` 显示的 CUDA 版本 (CUDA Version) 是该显卡支持的最高 CUDA 运行时版本, 但不一定是你当前安装的 CUDA 版本。

`nvidia-smi` 是 NVIDIA System Management Interface (NVIDIA 系统管理接口) 的命令行工具, 用于查询和管理 NVIDIA GPU 设备。作用

查看 GPU 设备信息

监控 GPU 使用情况 (显存占用、温度、功耗等)

进行 GPU 相关的管理 (如限制功耗、调整计算模式等)

如何检查当前系统安装的 CUDA 版本?

`nvidia-smi` 只能显示驱动支持的 CUDA 版本, 但实际安装的 CUDA 版本需要用以下方法检查:

- **`nvcc -version`**

示例输出:

```
nvcc: NVIDIA (R) Cuda compiler
```

```
release 11.8, V11.8.89
```

这里的 release 11.8 表示你实际安装的 CUDA 版本。

步骤 2: 选择合适的 CUDA 版本

运行 `cuda_test.py`, 按照注释检查运行结果。

如果安装的是 CPU 版本的 PyTorch:

1. 卸载当前 PyTorch

在终端运行:

- **`pip uninstall torch torchvision torchaudio`**

2. 安装支持 CUDA 的 PyTorch

根据你的 `nvcc -version` 显示 CUDA 12.6(例), 你可以安装适配的 PyTorch:

- **`pip install torch torchvision torchaudio --index-url https://download.pytorch.org/whl/cu121`**

这里的 cu121 代表 CUDA 12.1, 因为 PyTorch 可能还没有正式支持 12.6, CUDA 版本向下兼容, 所以你可以使用 CUDA 12.1 版本的 PyTorch。

3. 验证安装安装完成后, 再次运行: `cuda_test.py`, 结果应如下:

```
CUDA是否可用: True
CUDA版本: 12.1
PyTorch版本: 2.5.1+cu121
是否启用了cuDNN: True
PyTorch 使用的 GPU: NVIDIA GeForce RTX 4070 Laptop GPU
tensor([[ -0.4035,  0.2117,  0.4366],
        [ 0.9066,  0.8261, -1.3868],
        [ 0.2729, -0.9023, -0.0598]], device='cuda:0')
使用的设备: cuda
CPU 计算时间: 0.003161 秒
GPU 计算时间: 0.012626 秒
GPU 比 CPU 快 0.25 倍
```

图 1: Result

CUDA 与 PyTorch 的关系

CUDA Toolkit（驱动 + 编译工具）是全局安装的
安装在 C:\Files\GPU Computing Toolkit.X
适用于整个系统，所有环境共用。

PyTorch 和 cuDNN 可以在虚拟环境中独立管理

PyTorch 自带了对应的 CUDA 运行时，所以你可以在不同的虚拟环境中安装不同版本的 PyTorch 和 CUDA，即使你系统上安装的是某个特定版本的 CUDA。

什么是 cuDNN？

cuDNN（CUDA Deep Neural Network library）是 NVIDIA 专门为深度学习优化的 GPU 加速库，它在 TensorFlow、PyTorch 等框架中被广泛使用，用于加速卷积、池化、归一化、RNN 等深度学习运算。在 PyTorch 训练神经网络时，会涉及大量的卷积（Convolution）和 RNN 计算，如果没有 cuDNN，计算会非常慢！

PyTorch 默认使用 cuDNN 加速，大幅提高训练速度。

PyTorch GPU 版本已经自带 cuDNN，通常不需要手动安装！

什么是 CUDA？

CUDA（Compute Unified Device Architecture）是由 NVIDIA 推出的并行计算平台和编程模型，允许开发者使用 NVIDIA GPU 进行高效的并行计算。

简单来说，CUDA 让你可以用 GPU 的超强并行计算能力来加速程序，比如深度学习、科学计算、图像处理、视频编码、仿真建模等。

“安装 CUDA”，其实指的是安装 CUDA Toolkit

CUDA Toolkit 就是 NVIDIA 发布的软件开发包（SDK），里面包含了：

- 驱动接口（CUDA Driver API）
- 编译器（nvcc）
- 数学库（cuBLAS, cuFFT, cuDNN）
- 开发工具（Nsight）
- 运行时库（CUDA Runtime）

什么时候需要 CUDA Toolkit？

你想编译自定义 CUDA 内核（比如 PyTorch 的 nvcc 扩展）。你想使用其他 CUDA 相关库，比如 TensorRT、OpenCV GPU 加速。你希望 nvcc -version 能运行，以确认完整的 CUDA 安装