实测有用安装过程(python GPU版本)

方法四:(有效,最稳定的通过anaconda来安装python的tensorflow环境):

参考链接:

- https://blog.csdn.net/qq_39469721/article/details/113183974 安装horovod
- https://github.com/deepmodeling/deepmd-kit/blob/devel/doc/install/install-from-source.md#install-from-source-code 官方给的 horovod 安装
- 1、配置相关环境变量,并且创建一个虚拟python环境(位于ENV_PREFIX文件下)(这是在72的机子上的):

```
export ENV_PREFIX=/$PWD/hov
export CUDA_HOME=/usr/local/cuda-10.1/
export HOROVOD_CUDA_HOME=$CUDA_HOME
export HOROVOD_NCCL_HOME=$ENV_PREFIX
export HOROVOD_GPU_OPERATIONS=NCCL
conda env create --prefix $ENV_PREFIX --file env_only_conda.yml --force
```

其中env_only_conda.yml为

```
name: null
channels:
  - pytorch
  - conda-forge
  - defaults
dependencies:
  - cmake=3.17
  - cudatoolkit=10.1
  - cudnn=7.6
  - cupti=10.1
  - cxx-compiler=1.1
  - jupyterlab=2.2
  - mpi4py=3.0 # installs cuda-aware openmpi
  - nccl=2.5
  - nodejs=14
  - nvcc_linux-64=10.1
  - pip=20.1
  - python=3.7
  - pytorch=1.5
  - tensorboard=2.1
  - torchvision=0.6
```

2、安装tensorflow-gpu, mxnet, horovod

下载地址:

https://pypi.org/project/tensorflow-gpu/

我是通过windows下来之后,通过finalshell的中linux的rz命令进行文件传输,将./tensorflow_gpu-2.2.0-cp37-cp37m-manylinux2010_x86_64.whl传输到自己的目录下,然后通过下面命令安装:

```
#python -m pip --default-timeout=10000 --no-cache-dir install ./tensorflow-2.2.0-cp37-cp37m-manylinux2010_x86_64.whl -i https://pypi.tuna.tpython -m pip --default-timeout=10000 --no-cache-dir install ./tensorflow_gpu-2.2.0-cp37-cp37m-manylinux2010_x86_64.whl -i https://pypi.tun.python -m pip --default-timeout=10000 --no-cache-dir install mxnet-cu101mkl==1.6.* -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple python -m pip --default-timeout=10000 --no-cache-dir --no-binary=horovod install horovod==0.19.* -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple
```

其中:

- python -m 是将pip安装在当前的虚拟环境下
- --default-timeout=10000 防止出现Read time out的错误

- --no-cache-dir 清楚之前的缓存,防止出现THESE PACKAGES DO NOT MATCH THE HASHES FROM THE REQUIREMENTS FILE。
- - i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple 指使用清华源来进行下载,提高下载速度。

注意:

- 1、mxnet在没有需求的情况下可以不装,也是一个框架。
- 2、tensorflow-gpu安装过程中可能scipy库也会存在一点问题,如果安装失败,可以通过下面命令再次安装。
- 3、配置deepmd环境:

```
git clone --recursive https://github.com/deepmodeling/deepmd-kit.git deepmd-kit
cd /home/asc22g0/CK/deemd-kit
python -m pip install .
```

4、测试结果:

```
horovodrun --check-build # (查看horovodrun框架的build)
```

dp -h #(非deepmd-kit目录下,看是否能正常运行)