配置环境细节

配置这个程序需要的环境，主要需要两个个特别步骤：1、安装好rdkit包，2、配置好cuda-pytorch 的环境，3、安装好torch-geometric 包，

1、rdkit包

RDKIT包非常奇怪，需要对应好Python的版本和RDKIT版本，而且尝试了其他人的方法，版本对应都不成功。之前anaconda3 base环境中的RDKIT阴差阳错地安装成功了，因此就采用了其中的版本。

conda install -c rdkit rdkit=2019.03.4.0

conda install -c python python=3.7.3

在新建一个环境时，版本要满足这个，后续pytorch /torch-geometric 对Python具体版本无要求，3.7即可。

2、cuda-pytorch\_gpu环境

由于torch-geometric 不支持win10的cuda9.2, 因此自带的cuda9.1不能使用了。因此在cuda官网下载cuda10.1的版本到本地安装。

首先，下载CUDA安装包。每台电脑的显卡是不同的，选择相应的cuda。我的显卡的种类是GeForce GTX 1050 Ti，支持cuda,参考该博客：[win10下pytorch-gpu环境配置](https://blog.csdn.net/qq_39987519/article/details/105853229)，选择[CUDA Toolkit 10.1 update2](https://developer.nvidia.com/cuda-10.1-download-archive-update2) 的版本，选项按教程进行选择，下载到本地。

其次，安装CUDA。接着是CUDA的安装过程，使用管理员权限打开。中间遇到些许问题，导致安装不成功。参考[CUDA安装失败的一种解决办法](https://blog.csdn.net/weixin_40968474/article/details/89486737?utm_medium=distribute.pc_relevant_t0.none-task-blog-BlogCommendFromBaidu-1.control&depth_1-utm_source=distribute.pc_relevant_t0.none-task-blog-BlogCommendFromBaidu-1.control)，进行自定义安装，安装那两项，结果出人意料的成功了。

然后，安装cuDNN。参考[Windows 安装 CUDA/cuDNN](https://zhuanlan.zhihu.com/p/99880204)中选择cuDNN的版本及下载安装方法。下载完成之后将其解压，需要将以上三个文件复制到CUDA的安装目录中。

接着，进行系统变量 PATH中添加如图所示的几个环境变量。参考：[win10下pytorch-gpu环境配置](https://blog.csdn.net/qq_39987519/article/details/105853229)。然后验证安装是否成功即可。

最后，安装pytorch。在[pytorch官网](https://pytorch.org/)，选择Pytorch1.7（torch-geometric包需要），CUDA10.1（CUDA版本需要），获取conda安装指令，在cmd命令运行窗中自动安装pytorch, torchvision, torchaudio。推荐[使用conda使用清华镜像安装pytorch](https://blog.csdn.net/weixin_43226285/article/details/107302961)，速度会快很多。

3、安装torch-geometric包

1、安装torch-geometric 包，前，需要先安装4个需要的包，分别是torch-scatter, torch-sparse 、torch-cluster 、torch-spline-conv，参考[官网](https://github.com/rusty1s/pytorch_geometric)。[这里](https://pytorch-geometric.com/whl/)可以本地下载这四个基础包，选择[torch-1.7.0+cu101](https://pytorch-geometric.com/whl/torch-1.7.0+cu101.html)，然后下载正确的针对Python3.7 的版本（3.6,3.7,3.8均有）到本地。参考[python库下载本地安装](https://blog.csdn.net/weixin_40007668/article/details/110380662)，类似于pip install D:\anaconda\Lib\GDAL-3.0.4-cp36-cp36m-win\_amd64.whl，指定到储存的路径和文件名，在环境里用pip安装。

2、安装[torch-geometric](https://github.com/rusty1s/pytorch_geometric)包，pip install torch-geometric 即可。