# DM21 安裝流程圖

## 1. 確認系統環境



Linux 伺服器、原有 Python、尚未安裝 Conda

openSUSE Leap 15.1
Python 3.6.5

## 2. 安裝 Miniforge

MINIFORGE

先取得 Conda 環境管理工具

Miniforge 內含 Conda，並預設使用 conda-forge

## 3. 建立 DM21 專用 Python 環境

Conda

利用 Conda 建立獨立的 Python 3.10 環境

避免與系統原本 Python 產生衝突

## 4. 安裝 Git

Git

取得下載與管理原始碼的工具

## 5. 從 GitHub 取得 DM21 原始碼

GitHub

Google DeepMind 將 DM21 公開在 GitHub

利用 Git 的 sparse checkout 功能，只在工作目錄保留需要的 DM21 資料夾

## 6. 安裝相依套件

PIP

利用 pip 讀取 requirements.txt

- PySCF：量子化學與 SCF 計算
- TensorFlow：執行 DM21 神經網路模型

## 7. 安裝 DM21 套件本體



將 GitHub 取得的 DM21 原始碼安裝到 Python 環境

## 8. 測試安裝是否成功



確認套件能正常匯入

確認 PySCF、TensorFlow 和 DM21 可以成功匯入

## 9. 執行 DM21 計算



使用 xyz 結構檔與 dm21_sp.py 進行單點能量計算

執行 DM21 單點能量計算，確認 SCF 收斂後取得能量結果

## 各工具角色

- MINIFORGE **Miniforge：** 提供 Conda
- **Conda：** 建立 Python 環境
- **Git / GitHub：** 取得原始碼
- PIP **pip：** 安裝 PySCF、TensorFlow 與 DM21