Introduction à conda

Loïc Gouarin, Alexis Jeandet, Vincent Rouvreau

https://github.com/gouarin/conda_tutorial

Pourquoi utiliser conda?

- Multi plateformes
- 32 et 64 bits
- Multi langages
- Environnements

Pas besoin d'être administrateur de la machine!

Distributions

Anaconda

(https://www.anaconda.com/)

Miniconda

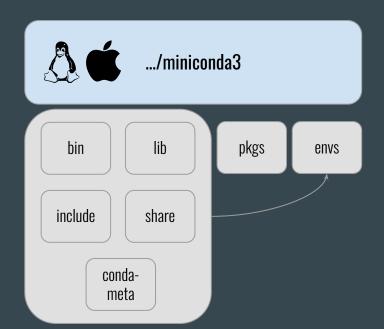
(https://conda.io/miniconda.html)

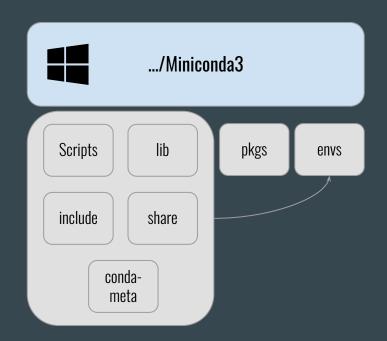
Anaconda Entreprise

Nous vous encourageons à utiliser miniconda.

Après avoir installé miniconda

- Surcharge de votre PATH
- Commande conda pour gérer les paquets
- Une version Python et quelques packages de base





Gérer ses environnements de travail

Environnements

Création

conda create -n myenv python=3.6

Activer

source activate myenv
activate myenv (windows)

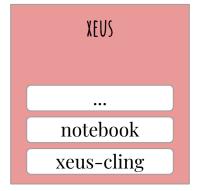
Désactiver

source deactivate myenv
deactivate myenv (windows)

Environnements







Environnements

Lister

conda env list

Enlever

conda env remove -n myenv

Recherche

```
conda search numpy
conda search 'numpy>1.10'
conda search '*numpy*'
```

Installation

```
conda install numpy
conda install numpy=1.14.5
```

L'installation se fait dans l'environnement où vous vous trouvez.

Vous pouvez spécifier un autre environnement

conda install -n myenv numpy

Enlever

conda remove numpy

Mise à jour (tout, juste un)

conda update
conda update numpy

Lister

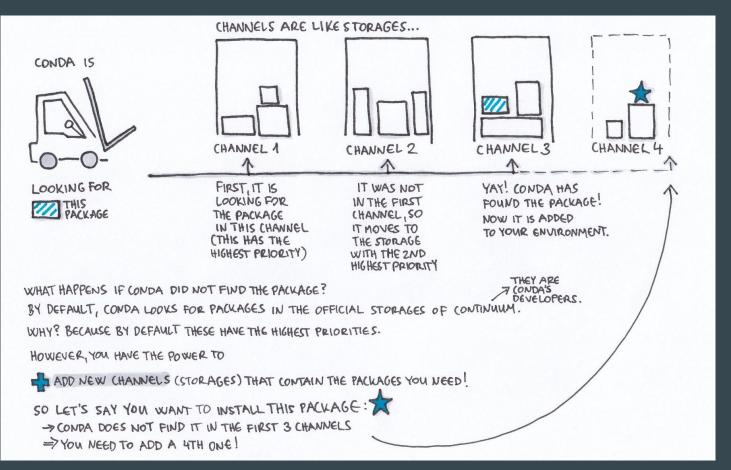
conda list

Utilisation de pip

```
pip search numpy
pip install numpy
```

Les dépôts

- Appelés *channels*
- Offre plus de choix
- Tout le monde peut ajouter ses packages



Les dépôts

Utiliser un dépôt ponctuellement

conda install -c conda-forge numpy

Ajouter un dépôt par défaut

conda config --add channels \
new_channel

Le retirer

conda config --remove channels \
new_channel

Lister les dépôts par défaut

conda config --show channels



ou en ligne de commande

conda install anaconda-client anaconda search numpy

ONE MORE ASPECT: PRIORITY > VERSION

LET'S SAY CHANNEL! (HIGHEST PRIDRITY CHANNEL) CONTAINS THE VERSION 1.0 OF THIS PACKAGE: AND CHANNEL 4 (LOWEST PRIORITY) CONTAINS A MUCH NEWER, 2.0 VERSION OF IT.

WHICH ONE IS GOING TO BE INSTALLED?

VERSION 1.0, SINCE IT IS INSIDE A HIGHER PRIORITY CHANNEL!







Distribuer son environnement

Le fichier environment.yml

name: myenv

channels:

- conda-forge
- gouarin

dependencies:

- python=3.6
- numpy
- scipy
- splinart
- pip:
 - pywavelets

Distribuer son environnement

L'export

conda list --explicit > myenv.txt

Démo!!

Exercice

- 1. Récupérer le fichier example.ipynb
- 2. Construire un environnement permettant d'avoir le notebook fonctionnel
- 3. Exporter l'environnement
- 4. Créer un environnement vierge à partir de cet export et voir si tout fonctionne bien

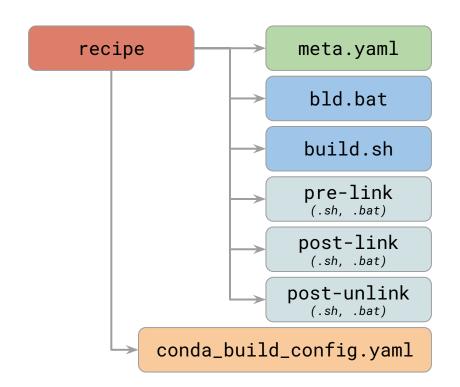
Construction de ses paquets

Construire son package conda

Les paquets indispensables

conda install conda-build

Structure du package



Exemple de meta.yaml

Informations du package

```
{% set name = "splinart" %}
{% set version = "0.1.9" %}
package:
  name: {{ name }}
  version: {{ version }}
source:
  git_rev: {{ version }}
  git_url: https://github.com/gouarin/{{ name }}.git
build:
 number: 0
  script: python setup.py install
```

Exemple de meta.yaml

Construction, test et installation

requirements:

build:

- python
- setuptools

run:

- python
- numpy
- matplotlib
- six

test:

imports:

- splinart

Exemple de meta.yaml

Construction, test et installation

```
requirements:
  host: (depuis conda-build 3)
    - python
    - setuptools
  run:
    - python
    - numpy
    - matplotlib
    - six
test:
  imports:
```

- splinart

Exemple de meta.yaml

Informations générales

about:

home: http://github.com/gouarin/splinart

license: BSD

description: 'spline art generator'

extra:

recipe-maintainers:

- gouarin

Exemple de build.sh

#!/bin/bash

python setup.py install

Construction en local

conda build recipe

Construction d'un environnement minimal

Installation des paquets nécessaire pour la construction

Exécution du build.sh

Installation du binaire dans un nouvel environnement vierge

Tests

Installation en local

conda install splinart --use-local

meta.yaml

Section source

Source depuis une archive

```
source:
    fn: xeus-cling-0.4.7.tar.gz
    url: https://github.com/QuantStack/xeus-cling/archive/0.4.7.tar.gz
    sha256: 713dched276882e4...
```

Source locale

source:
path: ../src

Ajout d'un patch

```
source:
...
patches:
- my.patch1
- my.patch2
```

Possibilité d'utiliser mercurial et svn comme pour git.

meta.yaml

Section requirements

Build

Tous les outils nécessaires pour construire le package qui sont indépendants de l'architecture cible

Host (depuis conda-build 3)

Tous les outils nécessaires pour construire le package sur une architecture cible

Run

Tous les outils nécessaires pour utiliser le package sur une architecture cible

meta.yaml

Section test

Requirements

```
test:
    requires:
          nose
```

Commands

```
test:
   commands:
    - test -f ${PREFIX}/bin/xeus-cling # [unix]
    - if exist %LIBRARY_PREFIX%\bin\xeus-cling.exe (exit 0) else
(exit 1) # [win]
```

Imports

```
test:
  imports:
    - splinart
```

Variables d'environnement

Conda build offre plusieurs variables d'environnement facilitant la construction du package.

- PREFIX
- PY_VER
- SRC_DIR
- ...

<u>Pour plus d'informations</u>

Les sélecteurs

```
package:
 name: mypackage
 version: 0.1
build:
  number: 0
  skip:
   - true # [ win and py<35 ]
requirements:
 host:
    - mpich # [linux]
    - openmpi # [osx]
    - msmpi # [win]
```

Voir la <u>liste complète</u>

Les variantes

- Permet de fixer les versions au build et au runtime

 Permet de faire plusieurs versions d'un package avec la même recette

conda_build_config.yaml

```
python:
- 2.7
- 3.5
- 3.6
```

conda_build_config.yaml

```
package:
  name: mypackage
  version: 0.1

...

requirements:
  host:
    - python {{ python }}
  run:
    - python
```

meta.yaml

conda_build_config.yaml

```
boost:
   - 1.61
   - 1.63
pin_run_as_build:
   boost: x.x
```

conda_build_config.yaml

```
package:
   name: mypackage
   version: 0.1

...

requirements:
   host:
    - boost {{ boost }}
   run:
    - boost
```

meta.yaml

Les compilateurs

```
requirements:
build:
    - {{ compiler('c') }}
    - {{ compiler('cxx') }}
    - {{ compiler('fortran') }}
```

Démo!!

Exercice

Ecrire la recette pour construire le package conda de l'un des projets suivants (ou un autre de votre choix)

- <u>https://github.com/bclmary/eccw_gui</u>
- https://github.com/vle-forge/vle
- https://bitbucket.org/bixente/3photons
- https://github.com/pierrepo/autoclasswrapper
- https://github.com/GenomicParisCentre/eouls an
- https://github.com/sagemath/sage_sample
- https://github.com/mirebeau/hamiltonfastmar ching/
- https://github.com/ToFuProject/tofu

Distribution de ses paquets

Son dépôt

Se créer un compte

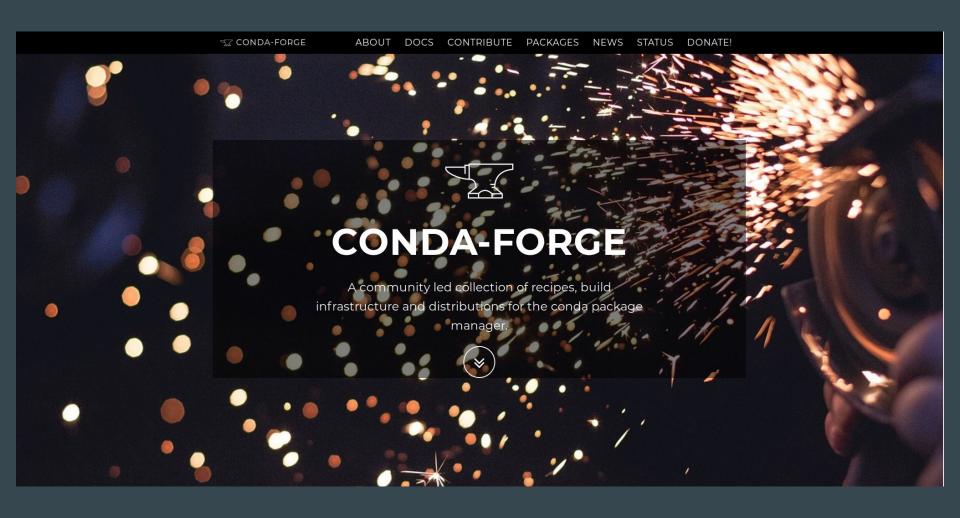
https://anaconda.org/

Une fois le package créé

anaconda upload .../miniconda3/conda-bld/...tar.bz2

Pour utiliser le package

conda install -c mychannel mypackage



conda-smithy

Facilite la construction d'un package sur différents OS

- Enregistre votre recette sur github
- Utilise les CI disponibles sur github
- Upload les packages directement sur anaconda cloud

A vos tokens!

Pour que conda-smithy fonctionne correctement

Il est nécessaire de mettre les tokens dans le répertoire \$HOME/.conda-smithy

- github.token
 https://github.com/settings/tokens/new
- anaconda.token
- circle.token
 https://circleci.com/account/api
- travis.token
- appveyor.token

https://ci.appveyor.com/api-token

Démo!!

Exercice

Déployer le package fait précédemment sur votre channel à l'aide de conda-smithy.