

Anaconda & Conda

Кроссплатформенный менеджер пакетов

Материал подготовил:
Андрей Томаровский

Версии библиотек Python могут различаться...



v1.25.2



v2.0.3



v0.12.2



Версии библиотек Python могут различаться...



v1.25.2

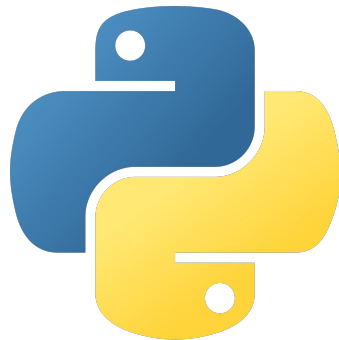


v2.0.3



seaborn

v0.12.2



v1.24.4

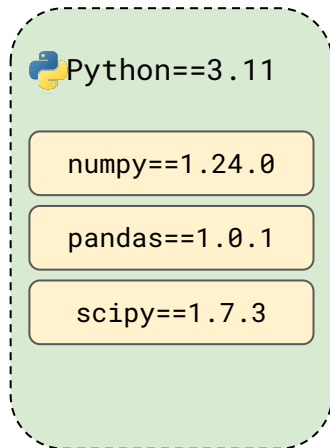


v1.3.5

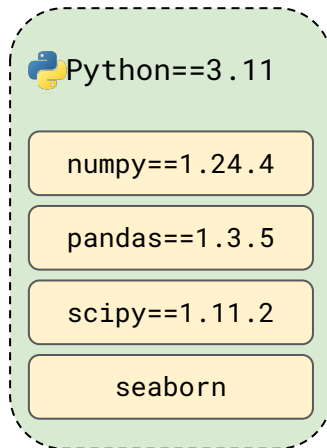


Решение – использовать изолированные **виртуальные окружения**.

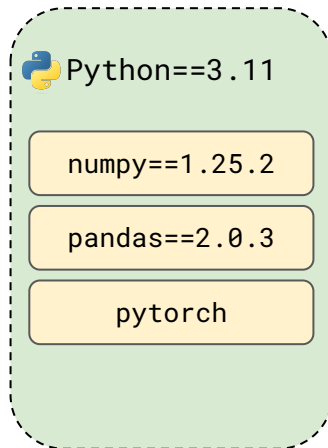
Окружение 1:



Окружение 2:



Окружение 3:



Виртуальное окружение Python – это инструмент, который позволяет изолировать и управлять зависимостями проекта, чтобы они не конфликтовали с другими проектами или системными пакетами.

Различные биоинформатические инструменты устанавливаются по разному...

```
source("https://bioconductor.org/biocLite.R")  
biocLite("DESeq2")
```

```
./configure --prefix=/usr/local  
make  
make install
```

```
install.packages("dplyr")
```

```
apt-get install bwa
```

```
cmake ../../my_project \  
-DCMAKE_MODULE_PATH=~/.devel/seqan/util/cmake \  
-DSEQAN_INCLUDE_PATH=~/.devel/seqan/include  
make  
make install
```

```
cpan -i BioPerl
```

```
pip3 install seaborn
```

```
pip3 install scikit-learn
```

Conda – это менеджер пакетов и система управления средой, не зависящая от языка.

Идея: стандартизация и упрощение установки с помощью “рецептов”.

- Исходный код или бинарные файлы
- “Рецепт” - сценарий установки



```
package:
  name: seqtk
  version: 1.2

source:
  fn: v1.2.tar.gz
  url: https://github.com/lh3/seqtk/archive/v1.2.tar.gz

requirements:
  build:
    - gcc
    - zlib
  run:
    - zlib

about:
  home: https://github.com/lh3/seqtk
  license: MIT License
  summary: Seqtk is a fast and lightweight tool for processing sequences

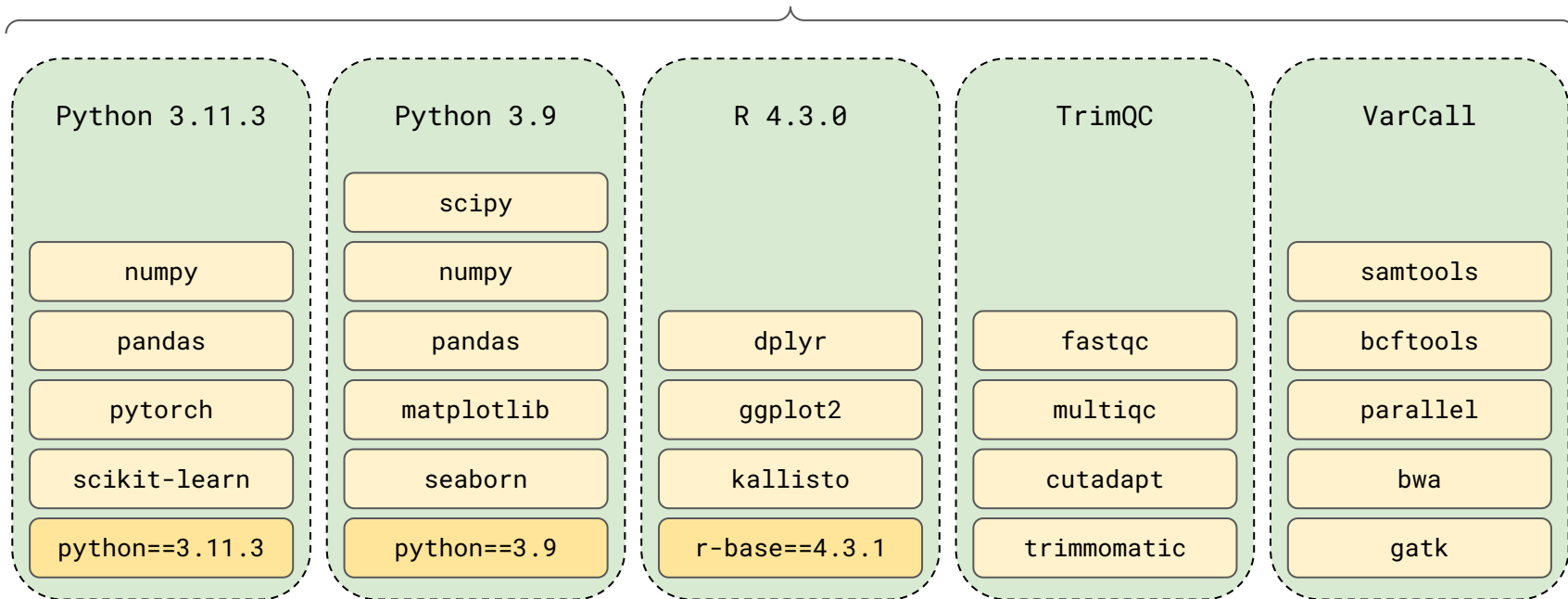
test:
  commands:
    - seqtk seq
```

```
#!/bin/bash

export C_INCLUDE_PATH=${PREFIX}/include
export LIBRARY_PATH=${PREFIX}/lib

make all
mkdir -p $PREFIX/bin
cp seqtk $PREFIX/bin
```

- Готовый к работе инструмент с необходимыми зависимостями



Conda: принцип работы

```
$ conda create -n myenv
$ conda activate myenv
$ (myenv) conda install -c conda-forge seaborn
$ (myenv) python3
Python 3.11.3 (main, Jun 5 2023, 09:32:32) [GCC 13.1.1
20230429] on linux
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more
information.
>>> import seaborn as sns
>>>
```



<https://conda-forge.org/>

BIOCONDA[®]

<https://bioconda.github.io/>

Environment (myenv)

seaborn

python >= 3.8

pandas >= 1.2

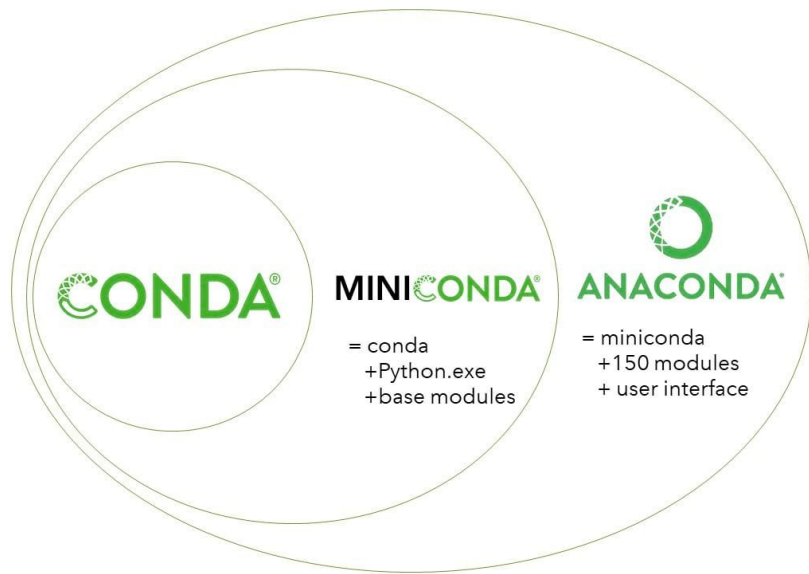
matplotlib >= 3.3

numpy >= 1.20, != 1.24.0

 ANACONDA.ORG

<https://anaconda.org/>

Установка Conda



Anaconda: <https://www.anaconda.com/download>

Miniconda: <https://docs.conda.io/en/latest/miniconda.html>

Mambaforge: <https://github.com/conda-forge/miniforge>

Установка в командной строке:

```
$ wget https://github.com/conda-forge/miniforge/releases/latest/download/Mambaforge-Linux-x86\_64.sh
```

```
$ bash Mambaforge-Linux-x86_64.sh
```

Conda: основные команды

Создать окружение:

```
$ conda create --name mybase
```

Удалить окружение:

```
$ conda env remove -n mybase
```

Просмотр созданных окружений:

```
$ conda env list
```

Активация окружение:

```
$ conda activate mybase
```

Установка нужного инструмента (например, parallel):

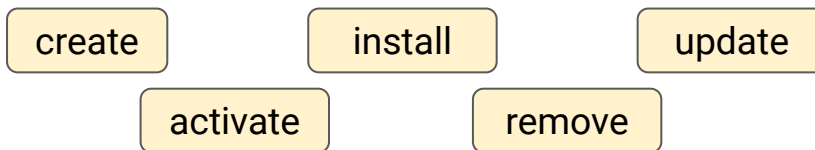
```
$ conda install -c conda-forge parallel
```

Создание окружения из файла:

```
$ conda env create -f myenv.yaml -n myenv
```

Деактивация активного окружения:

```
$ conda deactivate
```



channels:

- *conda-forge*
- *bioconda*

dependencies:

- *python=3.8*
- *parallel*
- *samtools*
- *bwa*

Bash: основные команды

Узнать текущий путь:

\$ pwd

Посмотреть содержимое директории:

\$ ls

Перейти в директорию:

\$ cd path/to/dir

Вернуться назад:

\$ cd ../../../../

Создать директорию:

\$ mkdir path/to/dir

Создать/отредактировать файл:

\$ nano file.txt

Удалить файл:

\$ rm path/to/file.txt

Удалить директорию:

\$ rm -r path/to/dir

Conda vs Docker

