

Conda

Conda es un gestor paquetes y entornos de software libre utilizado sobre todo para paquetes de Python y R del ámbito científico, aunque también soporte otros lenguajes como C, C++, FORTRAN, Java, Scale, Ruby y Lua.

Utilizar Conda en TeideHPC

Una vez nos hayamos conectados a los nodos de login, tendremos que cargar el módulo de `miniconda` para empezar a utilizar `conda`:

```
module load Miniconda2/4.7.10
```

Una vez cargado el software, podemos, por ejemplo, ver la información de la versión de `conda`:

```
conda info
  active environment : None
  user config file : /home/vjuidias/.condarc
  populated config files : /home/vjuidias/.condarc
  conda version : 4.7.10
  conda-build version : not installed
  python version : 2.7.16.final.0
  virtual packages :
  base environment : /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10 (read only)
  channel URLs : https://conda.anaconda.org/conda-forge/linux-64
                 https://conda.anaconda.org/conda-forge/noarch
                 https://conda.anaconda.org/bioconda/linux-64
                 https://conda.anaconda.org/bioconda/noarch
                 https://repo.anaconda.com/pkg/main/linux-64
                 https://repo.anaconda.com/pkg/main/noarch
                 https://repo.anaconda.com/pkg/r/linux-64
                 https://repo.anaconda.com/pkg/r/noarch
                 https://conda.anaconda.org/r/linux-64
                 https://conda.anaconda.org/r/noarch
  package cache : /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/pkg
                  /home/vjuidias/.conda/pkg
  envs directories : /home/vjuidias/.conda/envs
                    /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/envs
  platform : linux-64
  user-agent : conda/4.7.10 requests/2.22.0 CPython/2.7.16 Linux/
3.10.0-327.el7.x86_64 centos/7.2.1511 glibc/2.17
  UID:GID : 1136:1136
  netrc file : None
  offline mode : False
```

Ahora tenemos que inicializar la shell para utilizar Conda. **Este paso es solo necesario la primera vez.** Si no lo hacemos, al utilizar conda, nos saldrá este mensaje:

```
CommandNotFoundError: Your shell has not been properly configured to use 'conda activate'.
```

```
To initialize your shell, run
```

```
$ conda init <SHELL_NAME>
```

```
Currently supported shells are:
```

- bash
- fish
- tcsh
- xonsh
- zsh
- powershell

```
See 'conda init --help' for more information and options.
```

```
IMPORTANT: You may need to close and restart your shell after running 'conda init'.
```

Por tanto, lo que tenemos que hacer es:

```
conda init bash
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/condabin/conda
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/bin/conda
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/bin/conda-env
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/bin/activate
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/bin/deactivate
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/etc/profile.d/conda.sh
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/etc/fish/conf.d/conda.fish
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/shell/condabin/Conda.psm1
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/shell/condabin/conda-hook.ps1
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/lib/python2.7/site-packages/xontrib/conda.xsh
no change /opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/etc/profile.d/conda.csh
modified /home/vjuidias/.bashrc
```

```
==> For changes to take effect, close and re-open your current shell. <==
```

Al hacer esto se nos ha modificado la shell, en este caso, la bash. Se nos han añadido las siguientes líneas en el fichero `~/.bashrc`:

```
# >>> conda initialize >>>
# !! Contents within this block are managed by 'conda init' !!
__conda_setup="$(/opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/bin/conda 'shell.bash'
'hook' 2> /dev/null)"
if [ $? -eq 0 ]; then
    eval "$__conda_setup"
else
    if [ -f "/opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/etc/profile.d/conda.sh" ]; then
        . "/opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/etc/profile.d/conda.sh"
```

```
else
    export PATH="/opt/envhpc/slurm19/rhel7/Miniconda2/4.7.10/bin:$PATH"
fi
fi
unset __conda_setup
# <<< conda initialize <<<
```

Para que tenga efecto los cambios, tenemos que salir del nodo de login y volver a entrar. Una vez hecho, ya podremos utilizar conda, instalar paquetes y crear entornos.

Crear un entorno en /data

Por defecto, Conda creará un entorno e instalará todo el software en el `/home` del usuario. Este almacenamiento está limitado en tamaño, así que deberíamos configurar los entornos e instalar el software en la partición de `/data`. Para hacer esto, simplemente tenemos que especificarle a Conda la ruta:

```
conda create -p data/myenvironment mysoftware

Collecting package metadata (current_repodata.json): done
Solving environment: done

## Package Plan ##

environment location: /data/vjuidias/myenvironment
...
```

Y lo activamos de la misma manera, especificando la ruta:

```
conda activate /data/vjuidias/myenvironment
```