

➤ Module – Virtualenv – Conda

accompagnement-calcul@inrae.fr



> Lister les modules disponibles

CMD : module avail

Listes les modules disponibles : *module avail*

[maldonadoe@muse-login02 ~]\$ module avail

```
----- /usr/share/Modules/modulefiles -----  
dot      module-git module-info modules  null    use.own  
----- /trinity/shared/modulefiles/modulegroups -----  
cv-admin  cv-advanced cv-local  cv-standard local  
----- /trinity/shared/modulefiles/local -----  
Cast3M/2019      cwipi/gcc-7.5.0/0.11.1  jre/jre.8_x64      python/3.8.3_shared_library  
GMT/5.2.1        cwipi/intel2016/0.11.1  julia/1.1.0         python/Anaconda/3-5.1.0  
ImageMagick/7.0.3-10  flex/2.6.4              knem/1.1.2          sage/7.6  
JDK/jdk.8_x64      gdal/2.1.2              lapack-with-PIC/3.7.0  scite/3.7.1  
Nlopt/2.6.1        gdal/2.4.2              libarchive/3.3.2     singularity/2.2.1
```



INRAE

Titre de la présentation

Date / information / nom de l'auteur



> Charger un module

CMD : module load MODULENAME

```
[maldonadoe@muse-login02 ~]$ python --version  
Python 2.7.5
```

Chargement d'une autre version de Python

```
[maldonadoe@muse-login02 ~]$ module load python/3.8.2  
[maldonadoe@muse-login02 ~]$ python --version  
Python 3.8.2
```

Charger un module : module add|load MODULE_NAME

> Lister les modules chargés et infos dessus

CMD : module list

```
[maldonadoe@muse-login02 ~]$ module list
```

Currently Loaded Modulefiles:

1) *python/3.8.2*

CMD : module show MODULE_NAME

```
[maldonadoe@muse-login01 env]$ module show python/3.8.2
```

/trinity/shared/modulefiles/local/python/3.8.2:

prepend-path PATH /trinity/shared/apps/local/Python/3.8.2/bin

prepend-path LIBRARY_PATH /trinity/shared/apps/local/Python/3.8.2/lib

prepend-path LD_LIBRARY_PATH /trinity/shared/apps/local/Python/3.8.2/lib

prepend-path PKG_CONFIG_PATH

/trinity/shared/apps/local/Python/3.8.2/lib/pkgconfig

prepend-path MANPATH /trinity/shared/apps/local/Python/

prepend-path C_INCLUDE_PATH

> Décharger un ou des modules

CMD : module rm/unload NOMDUMODULE

module rm/unload (décharge 1 module)

```
[maldonadoe@muse-login02 ~]$ module unload python/3.8.2
```

```
[maldonadoe@muse-login02 ~]$ module list
```

No Modulefiles Currently Loaded.

module purge (décharge tous les modules)

> Doc & Aide

Site web du projet : [Environment Modules \(sourceforge.net\)](http://sourceforge.net/projects/environment-modules)

Doc officielle : [Environment Modules — Modules documentation](http://environment-modules.sourceforge.net/doc/)



INRAE

Titre de la présentation

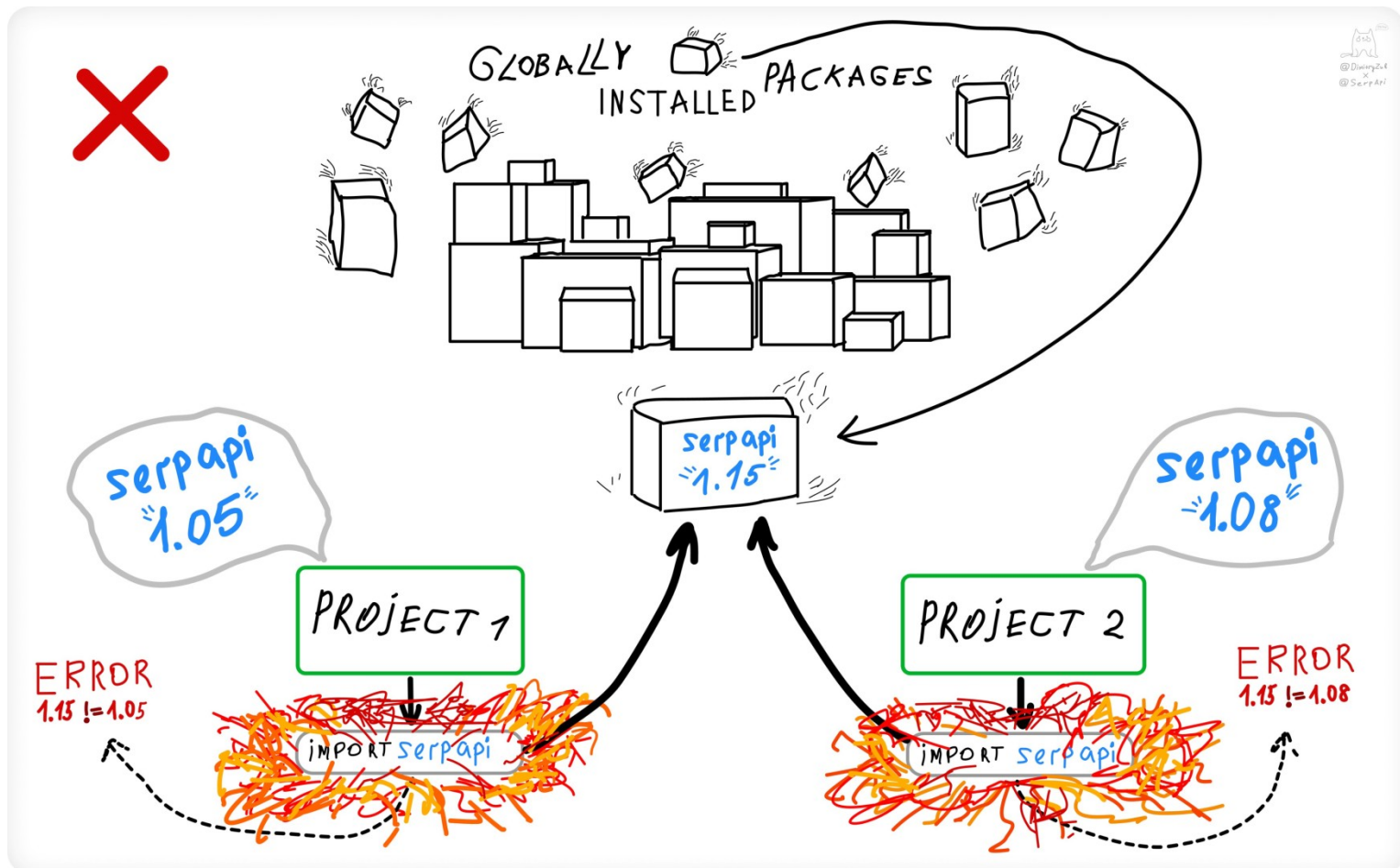
Date / information / nom de l'auteur



> Virtualenv

Environnements Python isolés

virtualenv crée un dossier qui contient tous les exécutables nécessaires pour utiliser les paquets qu'un projet Python pourrait nécessiter



➤ Virtualenv



serpapi
"1.05"

...
ACTIVATE ENVIRONMENT 1
(Environment activated) \$...

...
install serpapi==1.05

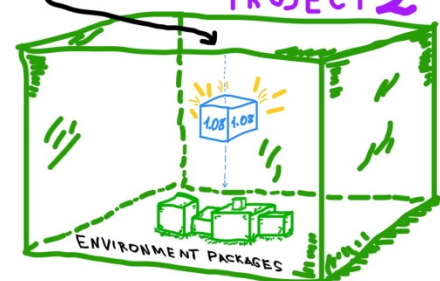
PROJECT 1



...
ACTIVATE ENVIRONMENT 2
(Environment activated) \$...

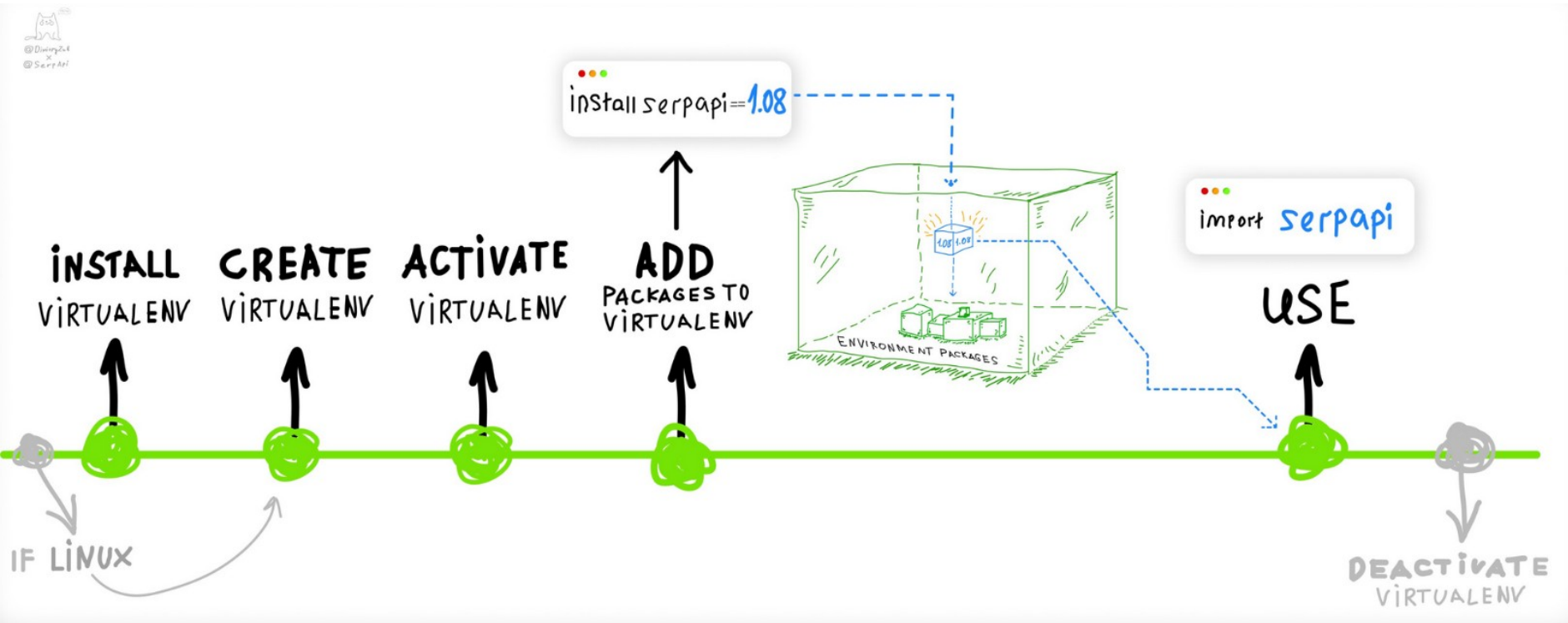
...
install serpapi==1.08

PROJECT 2



serpapi
"1.08"

> Virtualenv



> Virtualenv

Créer un env. virtuel

2 méthodes

- virtualenv

-pré-requis pip install virtualenv puis ajout dans son
PATH=\$PATH:\$HOME/.local/bin:

-virtualenv venv

- python3 -m venv env

```
[maldonadoe@muse-login01 venv]$ ls -al
total 12
drwxr-xr-x 4 maldonadoe inra_ea 80 Jun 17 14:32 .
drwxr-xr-x 5 maldonadoe inra_ea 95 Jun 17 14:32 ..
-rw-r--r-- 1 maldonadoe inra_ea 40 Jun 17 14:32 .gitignore
drwxr-xr-x 2 maldonadoe inra_ea 4096 Jun 17 14:32 bin
drwxr-xr-x 3 maldonadoe inra_ea 30 Jun 17 14:32 lib
-rw-r--r-- 1 maldonadoe inra_ea 344 Jun 17 14:32 pyenv.cfg
[maldonadoe@muse-login01 venv]$
```



> Virtualenv

Activer un env

`source venv/bin/activate`

Désactiver un env

`deactivate`

Supprimer un env. virtuel

Juste désactiver (`deactivate`) et suppression du répertoire



> Virtualenv

Installation classique de modules via pip : `pip install PACKAGE_NAME`
`pip install pandas`

Export de l'environnement

`pip freeze > requirements.txt`

Import de l'environnement

`virtualenv env_import`
`source env_import/bin/activate`
`pip install -r requirements.txt`



> Doc & Aide

[https://
python-guide-pt-br.readthedocs.io/fr/latest/dev/virtualenvs.html](https://python-guide-pt-br.readthedocs.io/fr/latest/dev/virtualenvs.html)

[https://www.reddit.com/r/Python/comments/rm1o5s/python_virtual_environment_what_why_how/
/](https://www.reddit.com/r/Python/comments/rm1o5s/python_virtual_environment_what_why_how/)



INRAE

Titre de la présentation

Date / information / nom de l'auteur



> Conda

Gestionnaire de packages et d'environnement en ligne de commande

- Opensource
- Package, dependency and environment management for any language—Python, R, Ruby, Lua, Scala, Java, JavaScript, C/ C++, FORTRAN, and more...
- Trans-platform Windows, macOS and Linux.

Pré-requis sur muse : charger le module Anaconda
module load python/Anaconda/3-5.1.0



> Conda

```
(base) [maldonadoe@muse-login01 ~]$ python  
Python 3.7.0 (default, Jun 28 2018, 13:15:42)  
[GCC 7.2.0] :: Anaconda, Inc. on linux
```

Création d'un env. virtuel

```
[maldonadoe@muse-login01 ~]$ conda create --name py38 python=3.8
```

Pour la première création d'un env

- conda init bash
- source .bashrc

Activation d'un env virtuel

```
conda activate py38
```

```
(py38) [maldonadoe@muse-login01 ~]$
```



> Conda

Où est ce stocké ?

```
[maldonadoe@muse-login01 ~]$ ls -al .conda/  
drwxrwsr-x 4 maldonadoe inra_ea 67 Jun 14 23:16 .  
drwx----- 8 maldonadoe inra_ea 4096 Jun 17 14:32 ..  
-rw-r--r-- 1 maldonadoe inra_ea 34 Jun 14 23:16 environments.txt  
drwxrwsr-x 3 maldonadoe inra_ea 56 Jun 14 23:16 envs  
drwxrwsr-x 23 maldonadoe inra_ea 4096 Jun 14 23:16 pkgs
```

```
[maldonadoe@muse-login01 ~]$ ls -al .conda/envs/py38/  
drwxr-sr-x 11 maldonadoe inra_ea 4096 Jun 14 23:16 .  
drwxrwsr-x 3 maldonadoe inra_ea 56 Jun 14 23:16 ..  
drwxr-sr-x 2 maldonadoe inra_ea 4096 Jun 14 23:16 bin
```

....



INRAE

Titre de la présentation

Date / information / nom de l'auteur

CONDA

> Conda

Lister les environnements disponibles : conda env list

Rechercher un package : conda search PACKAGENAME

[maldonadoe@muse-login01 ~]\$ conda search pandas
...

Installer un package : conda install PACKAGENAME

conda install pandas / conda install pandas=1.4.1

Ajout du channel communautaire conda-forge

conda config --env --add channels conda-forge

Installation d'un package depuis un repository :

conda install -c conda-forge pythran

Lister les packages de son environnement : conda list

Mettre à jour un package : conda update PACKAGENAME



> Conda

Déactivation d'un env virtuel : conda deactivate

Export d'un environnement (une fois l'environnement chargé)

`conda env export > environment.yml`

Fichier environment.yml :

name: py38

channels:

- conda-forge
- defaults

dependencies:

- _libgcc_mutex=0.1=conda_forge
- _openmp_mutex=4.5=2_gnu
- asttokens=2.0.5=pyhd8ed1ab_0
- astunparse=1.6.3=pyhd8ed1ab_0....

Import d'un environnement

`conda env create -n ENVNAME --file environment.yml`



> Doc & Aide

Tuto : <https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/getting-started.html>

Cheat Sheet : <https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/downloads/843d9e0198f2a193a3484886fa28163c/conda-cheatsheet.pdf>

Conda & R

<https://docs.anaconda.com/anaconda/user-guide/tasks/using-r-language/>

Comparaison Pip/conda:

<https://pythonspeed.com/articles/conda-vs-pip/>



> Packages d'OS

apt-get / high level package handling utility

install and --reinstall : installe un package

ex : apt-get install NOMPAQUET

remove : déinstalle un package

ex : apt-get remove NOMPAQUET

purge or --purge

update : recherche les mises à jour disponibles

ex : apt-get update

upgrade : installe les mises à jour disponibles dans l'update

ex : apt-get upgrade

clean and autoclean

apt-cache : recherche de paquet

ex : apt-cache search PAQUET_RECHERCHE





<https://guix.gnu.org/tr/cookbook/en/guix-cookbook.html>

<https://guix.gnu.org/blog/2022/celebrating-10-years-of-guix-in-paris/>



INRAE

Titre de la présentation

Date / information / nom de l'auteur