

Olaf Cluster **User Training**

Anaconda(or conda)



ESNET[®]

심희찬

11, Nov 2024

목차

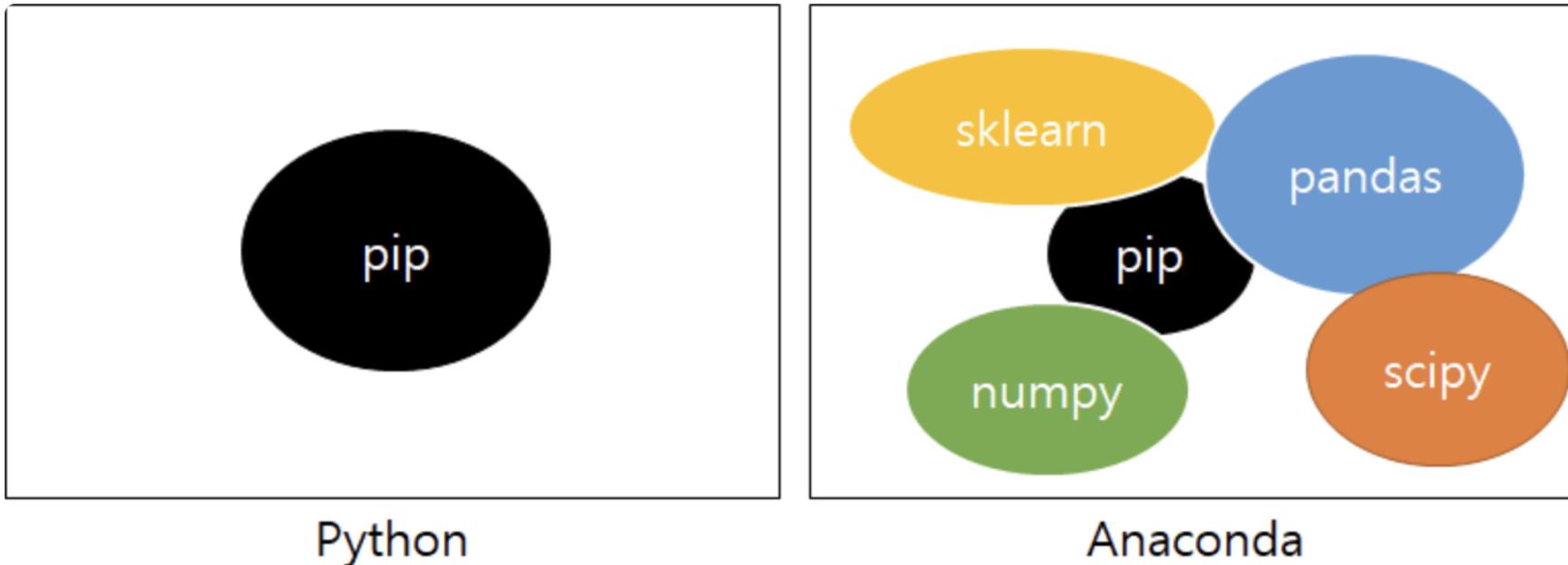
- ▶ 아나콘다(anaconda)란?
- ▶ Anaconda 설치 & 구동
- ▶ Conda 명령어 사용 방법
- ▶ 실습



아나콘다(anaconda)?

아나콘다란 ?

- 콘다(anaconda or conda)란 언어의 패키지, 의존관계, 환경을 관리하는 가상환경 도구입니다. 파이썬의 경우 2.x부터 시작해서 패키지의 버전에 따라 의존성이 강하기 때문에 콘다와 같은 가상환경을 두고 패키지를 관리하면 편합니다.



아나콘다란 ?

Conda 가상환경 예시

(Base) : python-3.11, pytorch X

(A) : python-3.12, pytorch-2.0.0

(B) : python-2.8, python-1.12.0

- 각 가상환경별로 설치된 패키지 버전이나 리스트를 다르게 구성할 수 있음
- 가상환경간의 전환이 자유로움

아나콘다란 ?

Conda 미사용 예시

1. 사용하려는 프로그램에 맞는 python 버전의 소스 다운로드
2. Python compile 및 설치
3. 환경 변수 세팅 (PATH, LIBRARY_PATH 등)
4. Python 패키지 설치 및 빌드
5. 프로그램 실행

아나콘다란 ?

Conda 사용 예시

1. 가상환경 생성 및 프로그램 설치

```
$ conda env create -f requirements.yaml
```

2. 가상환경 활성화

```
$ conda activate [env]
```

3. 프로그램 실행

```
$ python [py file]
```

Conda의 종류

- 아나콘다(anaconda)
 - 500개가 넘는 데이터 분석 패키지를 포함
 - 아나콘다는 패키지 의존성을 관리해주므로 가상환경에 따라 독립적으로 패키지 관리 가능
 - 회사 내에서도 상업용으로 무료로 사용할 수 있다

- 미니콘다(miniconda)
 - 아나콘다의 부트스트랩 버전
 - Conda, Python, 의존하는 패키지 및 pip, zlib 및 기타 몇 가지를 포함한 소수의 기타 유용한 패키지만 포함
 - 기본적인 요구 사항만 포함하고 있으며, 원하는 패키지를 그때그때 설치하여 사용
 - 아나콘다를 설치할 시간이나 디스크 공간이 없을 때
 - 파이썬과 conda 명령에 빠르게 액세스 가능



Anaconda 설치 & 구동

Conda 설치

1. Conda 설치

1. Source download

```
$ curl -O https://repo.anaconda.com/archive/Anaconda3-2024.10-1-Linux-x86\_64.sh
```

2. Excute shell file

```
$ sh Anaconda3-2024.10-1-Linux-x86_64.sh
```

3. Set prefix

```
Do you accept the license terms? [yes|no]
>>> yes

Anaconda3 will now be installed into this location:
/proj/home/ibs/bmttest/bmttest/anaconda3

- Press ENTER to confirm the location
- Press CTRL-C to abort the installation
- Or specify a different location below

[/proj/home/ibs/bmttest/bmttest/anaconda3] >>> /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/prog/anaconda3
```

Conda 설치

2. Conda 활성화

1. 콘다 base 활성화

```
$ source <PATH_TO_CONDA>/bin/activate
```

```
(base) [bmttest@olaf1 ~]$
```

2. conda bashrc 추가

```
$ conda init
```

※ 세션 접속시 base 자동활성화를 해제하려면 아래 명령어 입력

```
$ conda config --set auto_activate_base False
```

Conda module을 이용

Olaf module을 이용하여 anaconda 사용

1. module 검색

\$ module ava anaconda

```
edu@olaf1 $ module ava anaconda
----- /opt/ibs_lib/modulefiles/libraries -----
anaconda/23.09.0
```

2. module load

\$ module load anaconda/23.09.0

```
edu@olaf1 $ module load anaconda/23.09.0
```

3. 콘다 base 활성화

\$ source activate

4. conda bashrc 추가

\$ conda init



conda 명령어

Conda 명령어 사용법

1. `conda env list`
 - 가상환경 리스트 조회
2. `conda create -n [env_name]`
 - [env_name]으로 가상환경 생성
3. `conda [activate | deactivate] [env_name]`
 - [env_name] 가상환경 활성화/비활성화
4. `conda list`
 - 활성화된 가상환경에 설치된 패키지 리스트 조회
5. `conda install [Package]`
 - 활성화된 가상환경에 [Package] 설치
6. `conda remove [Package]`
 - 활성화된 가상환경의 [Package] 삭제
7. `conda info`
 - 설치된 아나콘다 정보 조회
8. `conda env remove -n [env_name]`
 - [env_name] 가상환경 삭제

Conda 명령어 사용법

```
$ conda env list
```

- 가상환경 리스트 조회

```
edu@olaf1 $ conda env list
# conda environments:
#
base                *  /opt/ibs_lib/apps/anaconda
ESMFold             /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/ESMFold
IgFold              /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/IgFold
RFdiffusionAA      /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/RFdiffusionAA
Rosetta-3.9         /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/Rosetta-3.9
SE3nv               /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/SE3nv
SE3nv_eval          /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/SE3nv_eval
af2_binder_design  /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/af2_binder_design
alphafold-2.3      /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/alphafold-2.3
alphafold2          /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/alphafold2
chroma               /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/chroma
deepAb              /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/deepAb
deepEMhancer        /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/deepEMhancer
diffab              /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/diffab
diffab-test         /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/diffab-test
dl_binder_design    /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs/dl_binder_design
```

Conda 명령어 사용법

```
$ conda create -n [env_name] [Options]
```

- [env_name]으로 가상환경 생성
- conda --help 명령어 options 조회 가능

```
edu@olaf1 $ conda create -n 20241111
```

- [활용 1] 가상환경을 생성하며, 라이브러리를 함께 설치하고 싶을때

```
edu@olaf1 $ conda create -n 20241111 python
```

- [활용 2] 가상환경을 생성하며, 특정 버전의 라이브러리를 함께 설치하고 싶을때

```
edu@olaf1 $ conda create -n 20241111 python=3.12
```

- [활용 3] --prefix 옵션을 통해 특정 경로에 가상환경 구성 가능

```
edu@olaf1 $ conda create --prefix=~/.prog/20241111 python=3.12
```

- [활용 4] yaml 파일을 통해 환경 생성 가능

```
edu@olaf1 $ conda env create -f requirements.yaml
```

Conda 명령어 사용법

\$ conda activate *[env_name]*

- *[env_name]* 가상환경 활성화

```
edu@olaf1 $ conda activate 20241111
(20241111)
edu@olaf1 $ which python
~/conda/envs/20241111/bin/python
(20241111)
edu@olaf1 $ python --version
Python 3.12.7
```

\$ conda deactivate

- 가상환경 비활성화

```
edu@olaf1 $ conda deactivate
(base)
edu@olaf1 $ which python
/opt/ibs_lib/apps/anaconda/bin/python
(base)
edu@olaf1 $ python --version
Python 3.11.5
```


Conda 명령어 사용법

```
$ conda install [Package]
```

- 활성화된 가상환경에 [Package] 설치

```
edu@olaf1 $ conda install numpy
Channels:
- defaults
Platform: linux-64
Collecting package metadata (repodata.json): done
Solving environment: done

## Package Plan ##

environment location: /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.conda/envs/20241111

added / updated specs:
- numpy

The following packages will be downloaded:
```

package	build	
mkl-service-2.4.0	py312h5eee18b_1	66 KB
mkl_fft-1.3.11	py312h5eee18b_0	205 KB
mkl_random-1.2.8	py312h526ad5a_0	324 KB
numpy-2.1.3	py312hc5e2394_0	11 KB
numpy-base-2.1.3	py312h0da6c21_0	8.5 MB
Total:		9.1 MB

Conda 명령어 사용법

```
$ conda remove [Package]
```

- 활성화된 가상환경의 [Package] 삭제

```
edu@olaf1 $ conda remove numpy
Channels:
  - defaults
Platform: linux-64
Collecting package metadata (repodata.json): done
Solving environment: done

## Package Plan ##

environment location: /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.conda/envs/20241111

removed specs:
  - numpy
```

Conda 명령어 사용법

\$ conda info

- 설치된 아나콘다 정보 조회

```
edu@olaf1 $ conda info

  active environment : 20241111
  active env location : /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.conda/envs/20241111
    shell level      : 2
  user config file   : /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.condarc
populated config files :
  conda version      : 24.3.0
  conda-build version : 24.3.0
  python version     : 3.11.5.final.0
    solver           : libmamba (default)
  virtual packages   : __archspec=1=cascadelake
                       __conda=24.3.0=0
                       __glibc=2.28=0
                       __linux=4.18.0=0
                       __unix=0=0
  base environment   : /opt/ibs_lib/apps/anaconda (read only)
  conda av data dir  : /opt/ibs_lib/apps/anaconda/etc/conda
  conda av metadata url : None
    channel URLs     : 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
  package cache      : /opt/ibs_lib/apps/anaconda/pkg
                       /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.conda/pkg
  envs directories   : /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.conda/envs
                       /opt/ibs_lib/apps/anaconda/envs
  platform           : linux-64
```

Conda 명령어 사용법

```
$ conda env remove -n [env_name]
```

- *[env_name]* 가상환경 삭제

```
edu@olaf1 $ conda env remove -n 20241111
```

```
Remove all packages in environment /proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.conda/envs/20241111:
```

```
Everything found within the environment (/proj/home/ibs/bmttest/bmttest/.conda/envs/20241111), including any conda environment configurations and any non-conda files, will be deleted. Do you wish to continue?  
(y/[n])? y
```

※ 참고 !!

가상환경을 삭제하게 될 경우 가상환경의 경로 밑에 있는 데이터를 모두 삭제하기에 재확인 필수!



실습

실습

1. Conda 활성화
Conda 설치 or anaconda module load
2. 2024-11-11 가상환경 생성
\$ conda create -n 2024-11-11 python
3. 가상환경 활성화
\$ conda activate 2024-11-11
4. 실행
\$ which python
\$ python -version
\$ conda list



질의 응답



감사합니다.