

Mathematica

blocked URL

- Opis
- Verzije
- Službena dokumentacija
- Licenca i korištenje (Supek)
 - Podnošenje posla
 - Primjer
 - Korištenje (Vrančić)
 - Pokretanje Mathematica virtualnog poslužitelja
 - Sigurnosna grupa
 - Stvaranje sigurnosne grupe
 - Postavke sigurnosne grupe
 - Dodjeljivanje sigurnosne grupe
 - Spajanje na Mathematica virtualni poslužitelj
 - Pokretanje Mathematica-e

Opis

Mathematica je komercijalni softver za matematičko računanje, simboličko i numeričko računanje, programiranje, vizualizaciju i analizu podataka. Ovaj softver omogućuje korisnicima da rade sa širokim spektrom matematičkih funkcija i formula, te ih primijene u različitim područjima kao što su matematika, fizika, kemija, biologija, financije, inženjerstvo i druge znanstvene discipline.

Srce ima na raspolaganju **28 takozvanih "floating seat"** ili "plivajućih" licenci. Ovaj tip licenciranja omogućava pristup Mathematica softvera većem broju korisnika, ali ograničava broj istovremenih korisnika tj. instanci Mathematica-e na 28. Osim 28 plivajućih licenci, računanje je ograničeno na **ukupno 224 "Subkernels-a"**. Subkerneli su pomoći procesi koji se pokreću kako bi se omogućilo korištenje distribuirano ili paralelno računanje. Broj subkernela koji se koriste u jednom poslu odgovara broju zatraženih CPU jezgara.

Verzije

Verzija	Modul	Red	Supek	Padobran	Vrančić
13.2.1	scientific/mathematica/13.2.1	cpu	✓	✗	✗
13.3.0	scientific/mathematica/13.3.0	cpu	✓	✗	✓
14.0.0	scientific/mathematica/13.3.0	cpu	✓	✗	✗

Službena dokumentacija

- <https://reference.wolfram.com/language/>

Licenca i korištenje (Supek)

! Interaktivni mod

Korištenje Mathematica softvera na Supeku ograničen je na komandno linijski mod. Za korištenje u interaktivnom modu pogledajte upute u "Korištenje (Vrančić)" poglavljju.

Broj dostupnih licenci i subkernela na Supek-u je podložan promjenama u budućnosti a korisnici mogu provjeriti trenutno stanje sa naredbom:

```
qstat -Bf
```

Ovom naredbom moguć je:

Pregled ukupno dostupnih licenci na Supeku

```
resources_available.math_cpu = 224 --> Broj subkernela  
resources_available.math_lic = 28 --> Broj licenci
```

i

Pregled licenci trenutno u upotrebi na Supeku

```
resources_assigned.math_cpu = 32 --> Broj subkernela  
resources_assigned.math_lic = 4 --> Broj licenci
```



Broj slobodnih licenci u trenutku provjere jednak je razlici ukupno dostupnih i licenci trenutno u potrebi. Za gore naveden primjer, broj slobodnih licenci iznosio bi **24**, tj. **192 subkemela**.

Podnošenje posla

U uzglavlju skripte za podnošenje posla **OBAVEZNO** je navesti dodatna 2 parametra **math_lic** i **math_cpu**.

math_lic - broj licenci koje rezervirate sa pokretanjem posla (**Uvijek 1!**)

math_cpu - broj subkernela koje rezervirate sa pokretanjem posla. Ovaj broj mora odgovarati broju jezgara zatraženih sa parametrom **select=broj jezgara**.



OBAVEZNO

math_lic=1

Primjer

Primjer u nastavku sastoji se od PBS skripte za podnošenje posla (test.pbs) i Mathematica skripte (hpc_test.wl) koje se moraju nalaziti u istom direktoriju da bi posao bio uspješno izvršen. Resursi i rezervacija licence (test.pbs) zatražena je po uputama iz poglavlja "Podnošenje posla".

Naredbe iz skripte hpc_test.wl izvršili će mathematica. Sa prve dvije linije pokreće se broj subkernela koji odgovara broju zatraženih jezgara sa parametrom **select** (u ovom slučaju 8). Nastavak skripte izvršiti će 2 iste naredbe sa jednom bitnom razlikom. Naredbom **ParallelTable** računanje će se izvršiti na **8 jezgara** dok će se u slučaju naredbe **Table** računanje izvršiti na **1 jezgru**.



Zahtjev broja jezgara izведен je **samo sa select** parametrom. Takođe definicijom posla, **PBS_NODEFILE** varijabla sadrži popis svih dodijeljenih jezgara (na jednom ili više čvorova) te će se u uvijek pokrenuti odgovarajući broj subkernela.

test.pbs

```
#PBS -N test_math  
#PBS -l select=8  
#PBS -j oe  
#PBS -l math_lic=1  
#PBS -l math_cpu=8  
  
cd ${PBS_O_WORKDIR}  
module load scientific/mathematica/13.2.1  
  
math -script hpc_test.wl
```

hpc_test.wl

```
h = ReadList[Environment["PBS_NODEFILE"], "String"];
Map[LaunchKernels[KernelConfiguration[#, "KernelCommand" -> "/apps/scientific/mathematica/13.2.1/Executables/wolfram"]]&, h]

t=AbsoluteTiming[Table[Length@FactorInteger[10^50+i], {i,20}]]
Print["Vrijeme racunanja na jednoj jezgri=", t]
t=AbsoluteTiming[ParallelTable[Length@FactorInteger[10^50+i], {i,20}]]
Print["Vrijeme racunanja na osam jezgra=", t]

CloseKernels[]
```

Korištenje (Vrančić)

Mathematica je dostupna u interaktivnom modu putem Mathematica GUI-a na Vrančiću.

Pokretanje Mathematica virtualnog poslužitelja

Prvi korak je pokretanje virtualnog poslužitelja iz unaprijed pripremljene slike naziva **mathematica-rocky-9** (Compute → Instances → Launch Instance → Source → mathematica-rocky-9). Kako je ukupan broj **subkernela** ograničen licencom, korisnicima se preporuča da za manje zahtjevne proračune koriste **m1.medium** (Launch Instance → Flavor) veličinu virtualnog poslužitelja jer će broj subkernela odgovarati broju CPU-a poslužitelja.

Više o upravljanju virtualnim poslužiteljima pročitajte na [poveznici](#).

Sigurnosna grupa

Nakon stvaranja virtualnog poslužitelja potrebno je napraviti i dodati sigurnosnu grupu kako bi virtualni poslužitelj mogao pristupiti poslužitelju mathematica licenci.

Stvaranje sigurnosne grupe

Upravljanje sigurnosnim grupama moguće je odabirom opcije "Security Groups" u "Network" padajućem izborniku.

Pritiskom na dugme "Create Security Group" otvoriti će se novi prozor u kojem je potrebno upisati proizvoljan naziv sigurnosne grupe (npr. mathematica).

The screenshot shows the OpenStack Horizon dashboard. The left sidebar is collapsed, and the main area displays the 'Security Groups' page under the 'Network' section. At the top right, the user's email 'imitrovi@srce.hr' is visible. The 'Create Security Group' dialog is open in the center. It has a 'Name *' field containing 'mathematica', a 'Description' field (empty), and a 'Create Security Group' button at the bottom. A tooltip for the 'Description' field explains that security groups are sets of IP filter rules applied to network interfaces of a VM, and that rules can be added after creation.

Postavke sigurnosne grupe

Nakon što je sigurnosna grupa napravljena potrebno ju je konfigurirati pritiskom na dugme "Manage Rules" te zatim "Add Rule".

Polja za pravilo sigurnosne grupe ispunjavaju se sa idućim vrijednostima:

- **Rule** - Custom TCP Rule
- **Description** - proizvoljan opis
- **Direction** - Ingress
- **Open Port** - Port
- **Port** - 16286
- **Remote** - CIDR
- **CIDR** - 161.53.0.232

Add Rule

Rule *

Custom TCP Rule

Description ⓘ

MathLM server

Direction

Ingress

Open Port *

Port

Port ⓘ

16286

Remote * ⓘ

CIDR

CIDR ⓘ

161.53.0.232

Description:

Rules define which traffic is allowed to instances assigned to the security group. A security group rule consists of three main parts:

Rule: You can specify the desired rule template or use custom rules, the options are Custom TCP Rule, Custom UDP Rule, or Custom ICMP Rule.

Open Port/Port Range: For TCP and UDP rules you may choose to open either a single port or a range of ports. Selecting the "Port Range" option will provide you with space to provide both the starting and ending ports for the range. For ICMP rules you instead specify an ICMP type and code in the spaces provided.

Remote: You must specify the source of the traffic to be allowed via this rule. You may do so either in the form of an IP address block (CIDR) or via a source group (Security Group). Selecting a security group as the source will allow any other instance in that security group access to any other instance via this rule.

Cancel Add

Dodjeljivanje sigurnosne grupe

Ispravno konfiguiriranu sigurnosnu grupu moguće je dodjeliti ranije stvorenom mathematica poslužitelju na popisu instanci (Compute → Instances). Iz padajućeg izbornika u stupcu "Actions" potrebno je odabratи opciju "Edit Security Groups". Sigurnosna grupa dodaje se iz popisa svih sigurnosnih grupa (lijeva strana prozora) na popis sigurnosnih grupa instance (desna strana prozora) pritiskom na dugme "+" i zatim "Save".

Edit Instance

Information * Security Groups

Add and remove security groups to this instance from the list of available security groups.

Warning: If you change security groups here, the change will be applied to all interfaces of the instance. If you have multiple interfaces on this instance and apply different security groups per port, use "Edit Port Security Groups" action instead.

All Security Groups	Instance Security Groups
Paraview	default
	Mathematica

Filter

Filter

Cancel Save

Spajanje na Mathematica virtualni poslužitelj

Na virtualni poslužitelj moguće se spojiti koristeći "**rocky**" korisničko ime i **IP adresu** virtualnog poslužitelja. Više o spajanju na virtualne poslužitelje pročitajte na [poveznici](#).

- ❗ Kako bi se Mathematica uspješno pokrenula, potrebno je spojiti se na virtualni poslužitelj uz proslijedivanje X11.

U slučaju korištenja **Linuxa** ili **macOS-a**, koristite naredbu:

```
ssh -X -i ~/.ssh/id_rsa rocky@<IP_adresa>
```

U slučaju korištenja **Windowsa**, potrebno je preuzeti aplikaciju **Xming** te je pokrenuti prije pokretanja **PuTTY-ja**.

Unutar PuTTY-ja, potrebno je uključiti **X11 forwarding** (*Connection → SSH → X11, Enable X11 forwarding*).

Pokretanje Mathematica-e

Mathematica na virtualnom poslužitelju pokreće se naredbom "**Mathematica**" u terminalu.