

# P3DFFT 库初始化

任广智

December 13, 2019

实空间和谱空间的转换

$$(N_x, \frac{N_y}{M_1}, \frac{N_z}{M_2}) \sim (\frac{N_x + 2}{2M_1}, \frac{N_y}{M_2}, N_z) \quad (1)$$

转换到我们定义的变量即为

$$(N_z, \frac{N_y}{M_2}, \frac{N_x}{M_1}) \sim (\frac{N_z + 2}{2M_2}, \frac{N_y}{M_1}, N_x) \quad (2)$$

所以,单进程下,当我们定义实空间网格数为 (64,256,256) 时,相应的谱空间网格数应该为 (33,256,256) 为了方便比较,我们定义谱空间网格数为 (64,256,256), 则相应的实空间网格数为 (126,256,256)。可以测试输出:

```
rank=          0 is alive.
real    space :      x      y      z
spectral space :      256    256    126
spectral space :      256    256     64
```

Figure 1:

那么考虑 MPI 并行化之后的情况,首先考虑 2 核的情况。假如系统中给出的并行方案是沿 x 方向并行,则预测实空间输出为 (128,256,126),而谱空间输出为 (256,128,64)。测试输出:

```
rank=          0 is alive.
rank=          1 is alive.
real    space :      x      y      z
spectral space :      128    256    126
spectral space :      256    128     64
real    space :      x      y      z
spectral space :      128    256    126
spectral space :      256    128     64
```

Figure 2:

可以看到两个进程的存在,而且网格划分符合预期。我这里是从谱空间开始的,即并行化方案根据 (y-z) 的网格来给出。所以这里两个进程实际上为谱空间中 y 方向上的网格划分,即 (2) 式中  $M_1 = 2, M_2 = 1$ , 所以,当转换到实空间的时候,就变成了在 x 方向上的网格划分。这验证了 (2) 式的正确性。

进一步地,定义实空间中 MPI 二维并行化之后的网格数为  $(N_z, N_{y\_p}, N_{x\_p})$ , 谱空间中并行化的方案为  $(K_z\_p, K_{y\_p}, N_x)$ , 我们可以通过 8 核运算来验证之前的结论。

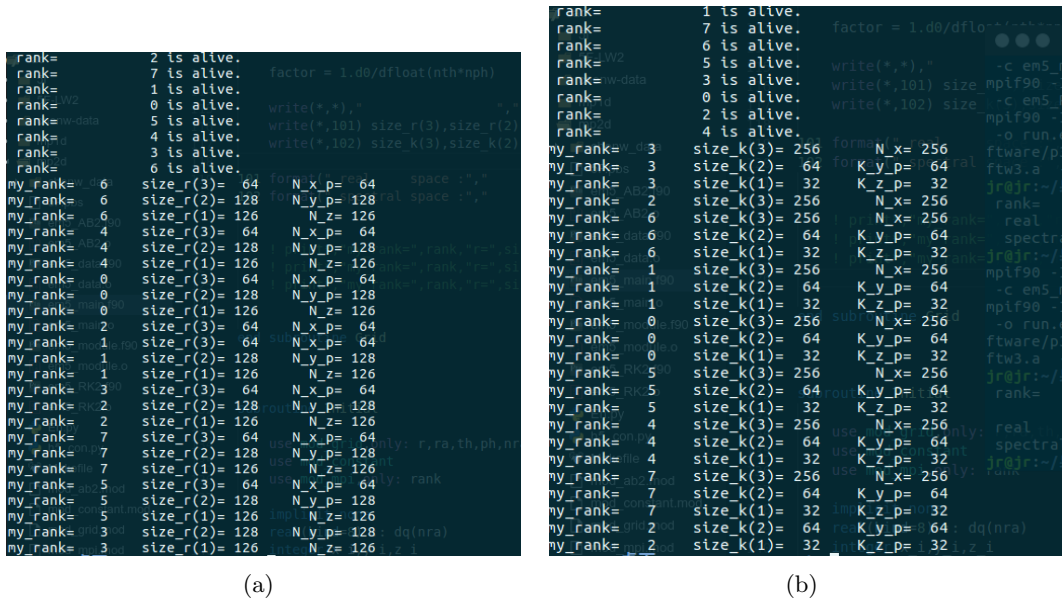


Figure 3:

可以看出，实空间谱空间的网格划分均符合我们的预期。

需要注意的是，以上的例子都是无论在实空间还是谱空间中，经过划分的网格大小在每个进程当中都是一样的，当出现总网格数不能整除这个维度上的进程数的时候，P3DFFT 库会自动采取另外的划分方案，即进程中的网格数不一定一致，使用时要注意。

所以，回到 P3DFFT 库的初始化上，初始如果在实空间采取 2 维 MPI 的并行方案，则 `dim_xy(0)` 为径向进程数，`dim_xy(1)` 为极向进程数，则 P3DFFT 库的初始化应该为

```
1 dim_p3d(0) = dim_xy(1)
2 dim_p3d(1) = dim_xy(0)
3
4 call P3DFFT_SETUP(MPI_comm_world, dim_p3d, nph, nth, nra, .true., memsize)
5 call P3DFFT_GET_DIMS(start_r, end_r, size_r, 1)
6 call P3DFFT_GET_DIMS(start_k, end_k, size_k, 2)
```

当在谱空间采用 2 维并行化方案时，则 `dim_yz` 代表极向和环向的进程数，则 P3DFFT 库初始化应该为：

```
1 dim_p3d(0) = dim_yz(1) ! kz -> ny M2
2 dim_p3d(1) = dim_yz(0) ! ky -> nx M1
3
4 call P3DFFT_SETUP(MPI_comm_world, dim_p3d, nph, nth, nra, .true., memsize)
5 call P3DFFT_GET_DIMS(start_r, end_r, size_r, 1)
6 call P3DFFT_GET_DIMS(start_k, end_k, size_k, 2)
```

在上述两进程的例子中，如果我们使用了错误的初始化，即进程数在两个维度上给反的情况时，则上述分析不一定能成立，除非  $M1=M2$ 。