



# 第6回計算科学技術特論B(2026) 大規模系での高速フーリエ変換1 筑波大学 高橋大介

2026年5月21日(木) 13:00 – 14:30

主催: 高度情報科学技術研究機構(RIST)

次世代HPC・AI研究開発支援センター(HAIRDESC)

共催: 東京大学物性研究所

後援: 理化学研究所計算科学研究センター、

計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)

# 講義内容

- 高速フーリエ変換
- ブロック三次元FFTアルゴリズム
- 並列FFTアルゴリズム

# 高速フーリエ変換

- 高速フーリエ変換(FFT)は, 離散フーリエ変換(DFT)を高速に計算するアルゴリズム.
- 理学分野での応用例
  - 偏微分方程式の解法
  - 畳み込み, 相関の計算
  - 第一原理計算における密度汎関数法
- 工学分野での応用例
  - スペクトラムアナライザ
  - CTスキャナ・MRIなどの画像処理
  - 地上波デジタルテレビ放送や無線LANで用いられているOFDM(直交周波数多重変調)では, 変復調処理にFFTを用いている.

# 離散フーリエ変換 (DFT)

- 離散フーリエ変換 (DFT) の定義

$$y(k) = \sum_{j=0}^{n-1} x(j) \omega_n^{jk}$$

$$0 \leq k \leq n - 1, \omega_n = e^{-2\pi i/n}$$

# 行列によるDFTの定式化(1/4)

- $n = 4$ のとき, DFTは以下のように計算できる.

$$y(0) = x(0)\omega^0 + x(1)\omega^0 + x(2)\omega^0 + x(3)\omega^0$$

$$y(1) = x(0)\omega^0 + x(1)\omega^1 + x(2)\omega^2 + x(3)\omega^3$$

$$y(2) = x(0)\omega^0 + x(1)\omega^2 + x(2)\omega^4 + x(3)\omega^6$$

$$y(3) = x(0)\omega^0 + x(1)\omega^3 + x(2)\omega^6 + x(3)\omega^9$$

## 行列によるDFTの定式化(2/4)

- 行列を用いると, より簡単に表すことができる.

$$\begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ y(2) \\ y(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega^0 & \omega^0 & \omega^0 & \omega^0 \\ \omega^0 & \omega^1 & \omega^2 & \omega^3 \\ \omega^0 & \omega^2 & \omega^4 & \omega^6 \\ \omega^0 & \omega^3 & \omega^6 & \omega^9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix}$$

- $n^2$ 回の複素数の乗算と,  $n(n-1)$ 回の複素数の加算が必要.

# 行列によるDFTの定式化(3/4)

- $\omega_n^{jk} = \omega_n^{jk \bmod n}$  の関係を用いると、以下のように書き直すことができる。

$$\begin{bmatrix} y(0) \\ y(1) \\ y(2) \\ y(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega^1 & \omega^2 & \omega^3 \\ 1 & \omega^2 & \omega^0 & \omega^2 \\ 1 & \omega^3 & \omega^2 & \omega^1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix}$$

# 行列によるDFTの定式化(4/4)

- 行列の分解により, 乗算回数を減らすことができる.

$$\begin{bmatrix} y(0) \\ y(2) \\ y(1) \\ y(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \omega^0 & 0 & 0 \\ 1 & \omega^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \omega^1 \\ 0 & 0 & 1 & \omega^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \omega^0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \omega^0 \\ 1 & 0 & \omega^2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix}$$

これを再帰的に行うと, 演算量を $O(n \log n)$ にできる(データ数 $n$ は合成数である必要がある).

# DFTとFFTの演算量の比較

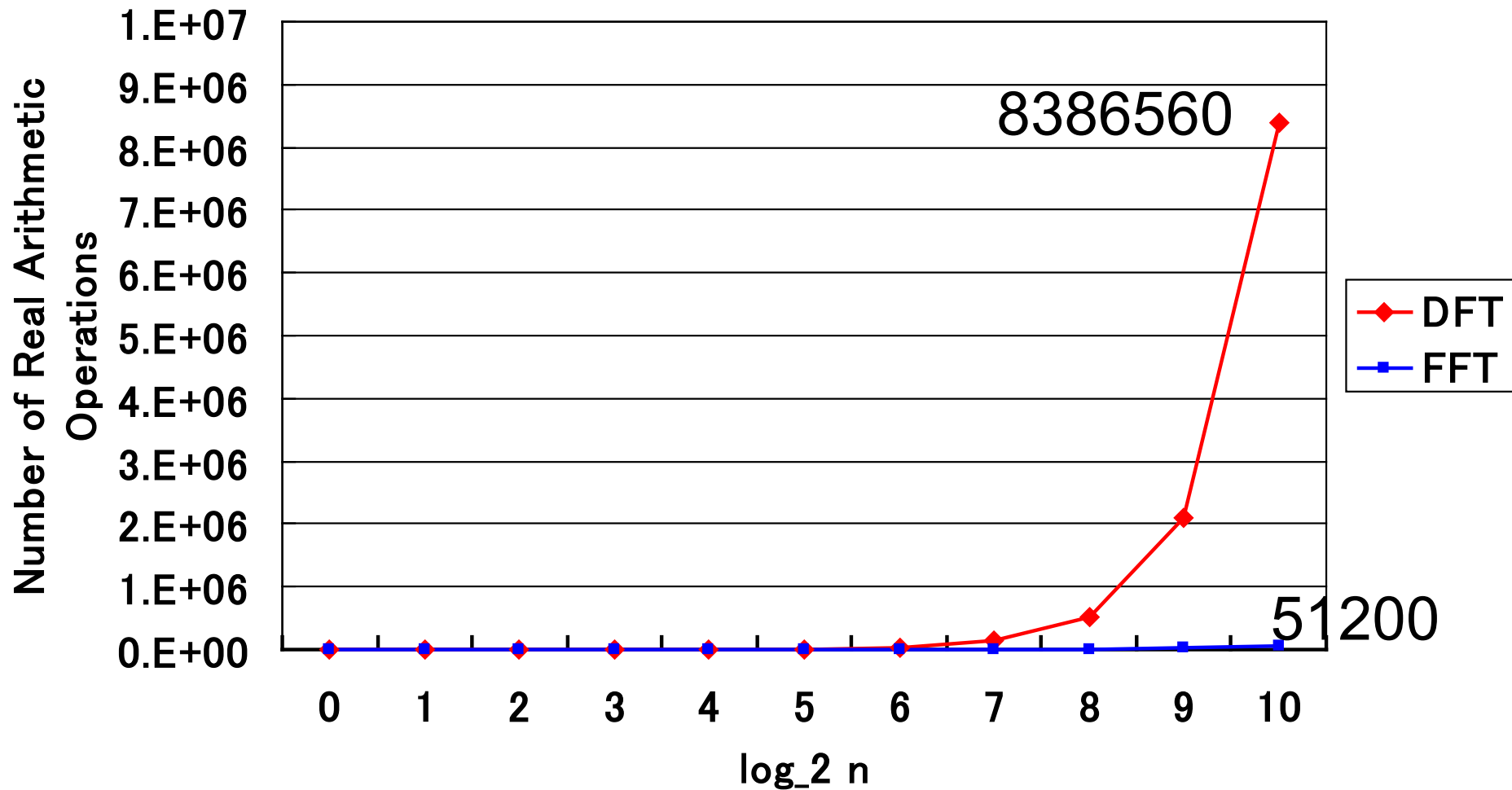
- DFTの実数演算回数

$$T_{DFT} = 8n^2 - 2n$$

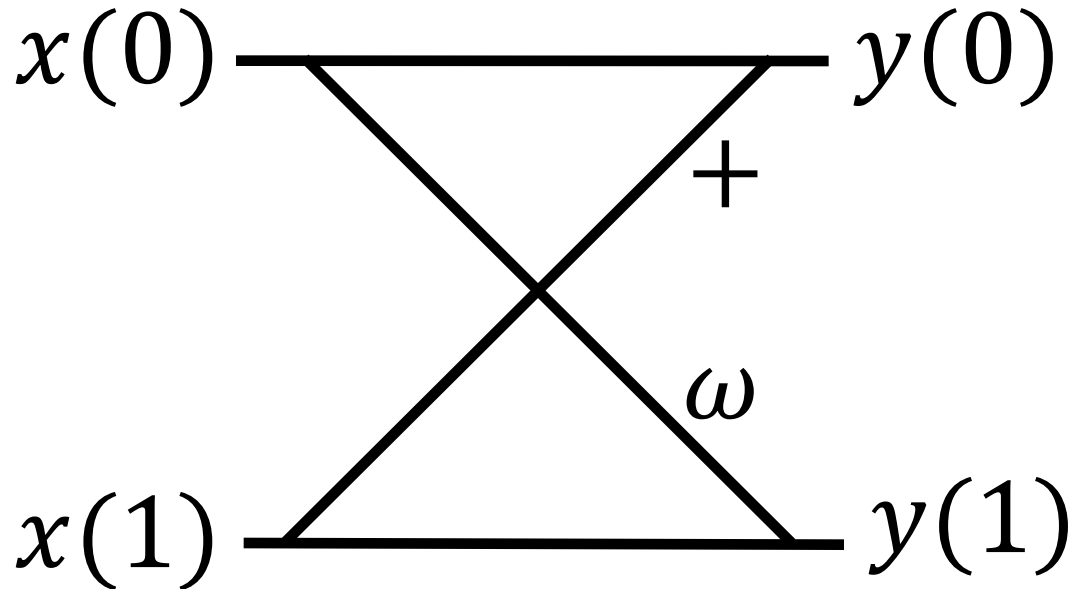
- FFTの実数演算回数  
( $n$ が2のべきの場合)

$$T_{FFT} = 5n \log_2 n$$

# DFTとFFTの演算量の比較



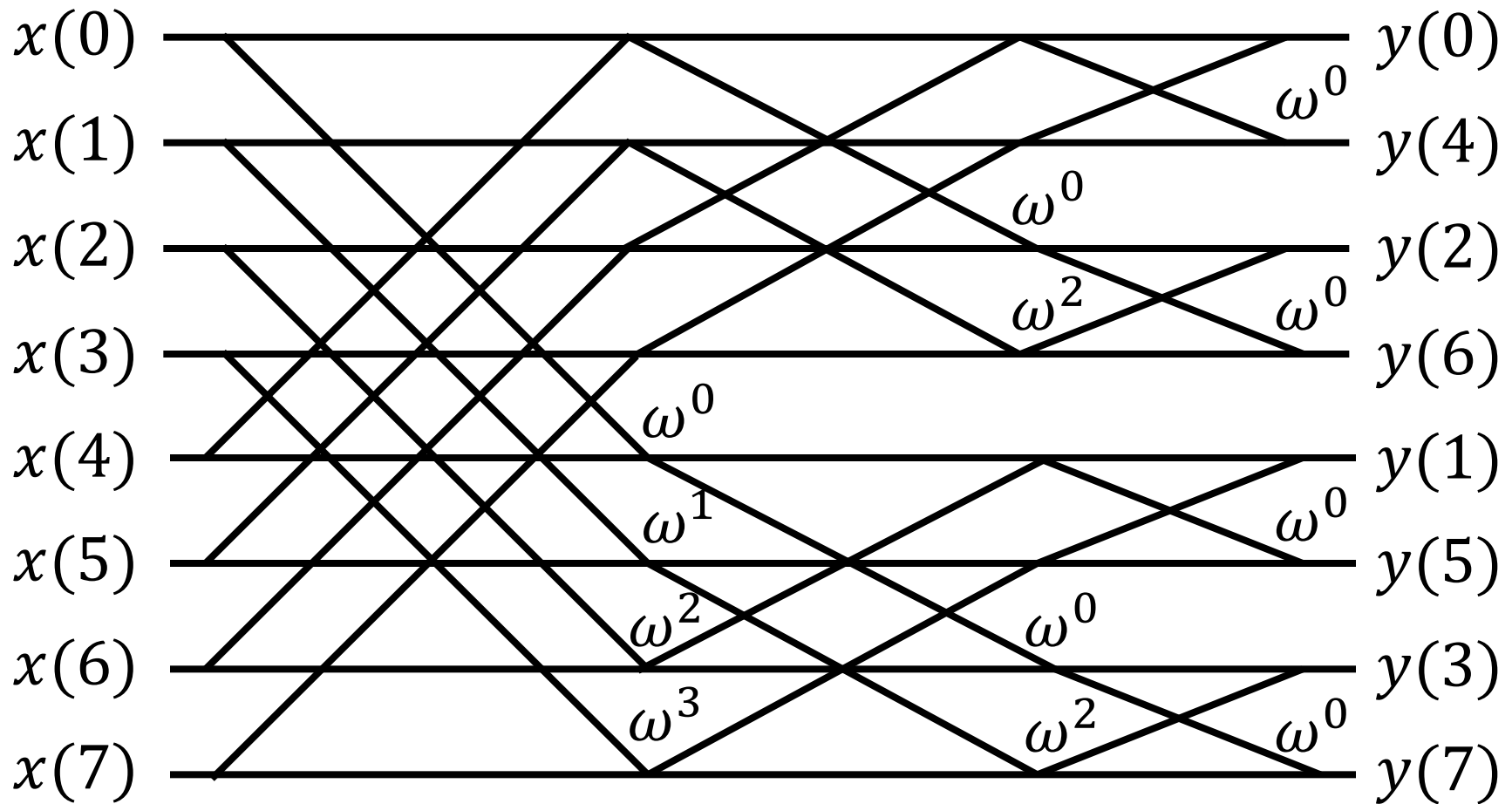
# バタフライ演算



$$y(0) = x(0) + x(1)$$

$$y(1) = \omega\{x(0) - x(1)\}$$

# Cooley-Tukey FFTの信号流れ図



# FFTカーネル部分の例

```
SUBROUTINE FFT2(A,B,W,M,L)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
DIMENSION A(2,M,L,*),B(2,M,2,*),W(2,*)
```

C

```
DO J=1,L
  WR=W(1,J)
  WI=W(2,J)
  DO I=1,M
    B(1,I,1,J)=A(1,I,J,1)+A(1,I,J,2)
    B(2,I,1,J)=A(2,I,J,1)+A(2,I,J,2)
    B(1,I,2,J)=WR*(A(1,I,J,1)-A(1,I,J,2))-WI*(A(2,I,J,1)-A(2,I,J,2))
    B(2,I,2,J)=WR*(A(2,I,J,1)-A(2,I,J,2))+WI*(A(1,I,J,1)-A(1,I,J,2))
  END DO
END DO
RETURN
END
```

# $n = n_1 n_2$ に対するFFTアルゴリズム

- $n = n_1 n_2$ で与えられるとすると, DFTの定義式における $j$ および $k$ は以下のように表すことができる.

$$j = j_1 + j_2 n_1, \quad j_1 = 0, 1, \dots, n_1 - 1, \quad j_2 = 0, 1, \dots, n_2 - 1$$
$$k = k_2 + k_1 n_2, \quad k_1 = 0, 1, \dots, n_1 - 1, \quad k_2 = 0, 1, \dots, n_2 - 1$$

- 上記の表現を用いると, DFTの定義式を以下のように書き換えることができる.

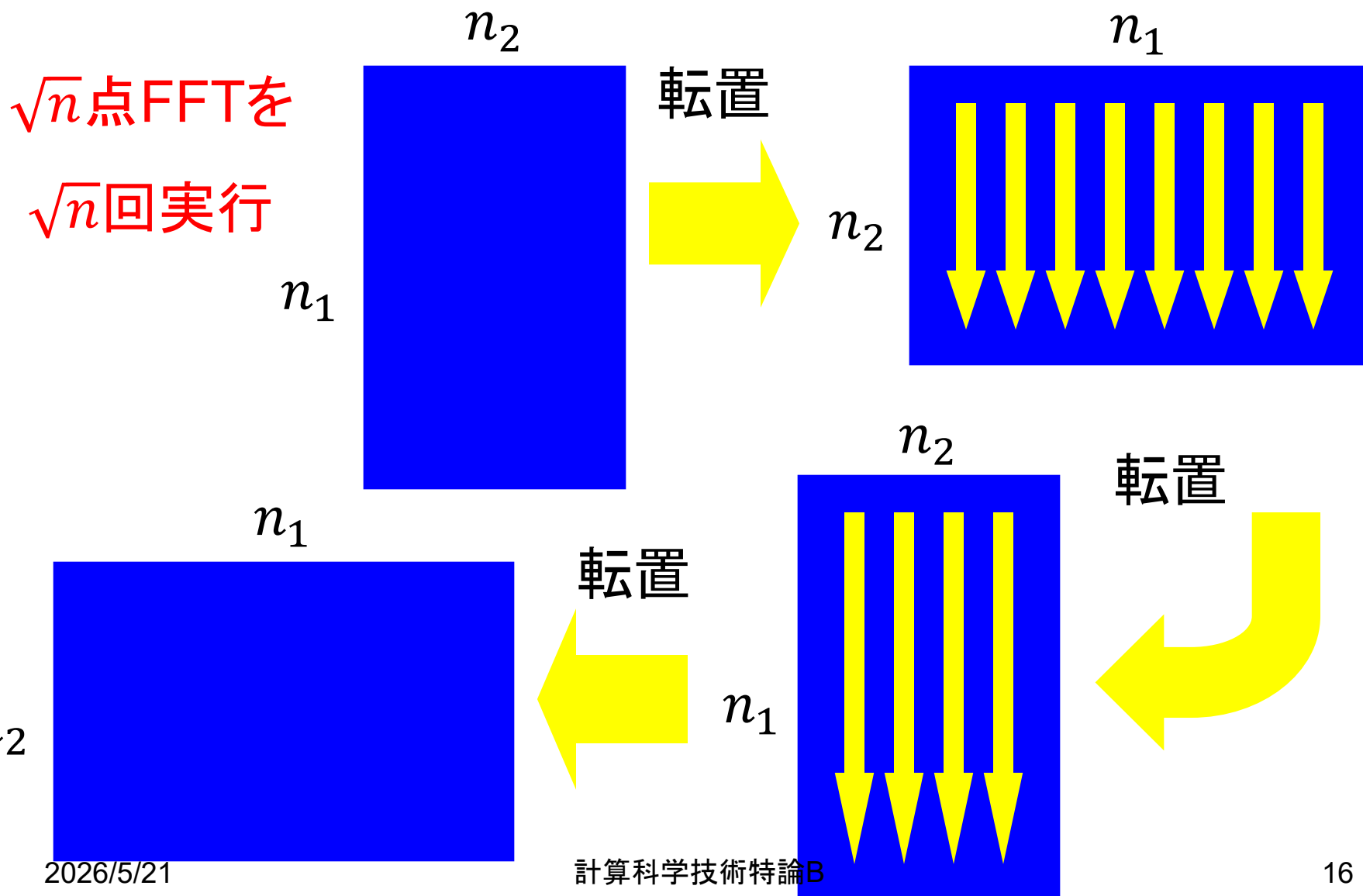
$$y(k_2, k_1) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} \left[ \sum_{j_2=0}^{n_2-1} x(j_1, j_2) \omega_{n_2}^{j_2 k_2} \omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2} \right] \omega_{n_1}^{j_1 k_1}$$

- $n$ 点DFTを $n_1$ 点DFTと $n_2$ 点DFTに分解している.

# Six-Step FFTアルゴリズム

1. 行列の転置
2.  $n_1$ 組の $n_2$ 点multicolumn FFT
3. ひねり係数 ( $\omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2}$ ) の乗算
4. 行列の転置
5.  $n_2$ 組の $n_1$ 点multicolumn FFT
6. 行列の転置

# Six-Step FFTアルゴリズム



# Six-Step FFTのプログラム例

```
SUBROUTINE FFT(A,B,W,N1,N2)
  COMPLEX*16 A(*),B(*),W(*)
```

C

```
CALL TRANS(A,B,N1,N2)
```

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置

```
DO J=1,N1
```

```
  CALL FFT2(B((J-1)*N2+1),N2)
```

$N1$ 組の $N2$ 点 multicolumn FFT

```
END DO
```

```
DO I=1,N1*N2
```

```
  B(I)=B(I)*W(I)
```

ひねり係数( $W$ )の乗算

```
END DO
```

```
CALL TRANS(B,A,N2,N1)
```

$N2 \times N1$ 行列を $N1 \times N2$ 行列に転置

```
DO J=1,N2
```

```
  CALL FFT2(A((J-1)*N1+1),N1)
```

$N2$ 組の $N1$ 点 multicolumn FFT

```
END DO
```

```
CALL TRANS(A,B,N1,N2)
```

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置

```
RETURN
```

```
END
```

# ブロック三次元FFTアルゴリズム

# 背景

- 多くのFFTアルゴリズムはデータがキャッシュに載っている場合には高い性能を示す.
- しかし, 問題サイズがキャッシュより大きくなった場合, 著しく性能が低下する.
- FFTアルゴリズムにおける目標としては,
  - いかにしてメモリアクセスを上位のメモリ階層に封じ込めるか. つまり, いかにかキャッシュミスの回数を減らすか.
  - かつ主記憶のアクセス回数をできるだけ減らす.
- 通常の三次元 FFTでは,
  - 3回のmulticolumn FFT
  - 3回の行列の転置 → ボトルネックが必要.

# 目的

- ボトルネックとなる行列の転置は、ブロック化することにより、キャッシュヒット率を上げることが可能.
- しかし、通常の三次元FFTではmulticolumn FFTと行列の転置が分離されている.
  - 主記憶からキャッシュにロードされたデータは、行列の転置だけ、もしくはmulticolumn FFTにしか用いられていない.
- 行列の転置を単にブロック化するだけでは、キャッシュ内のデータの再利用性が低い.

# 方針

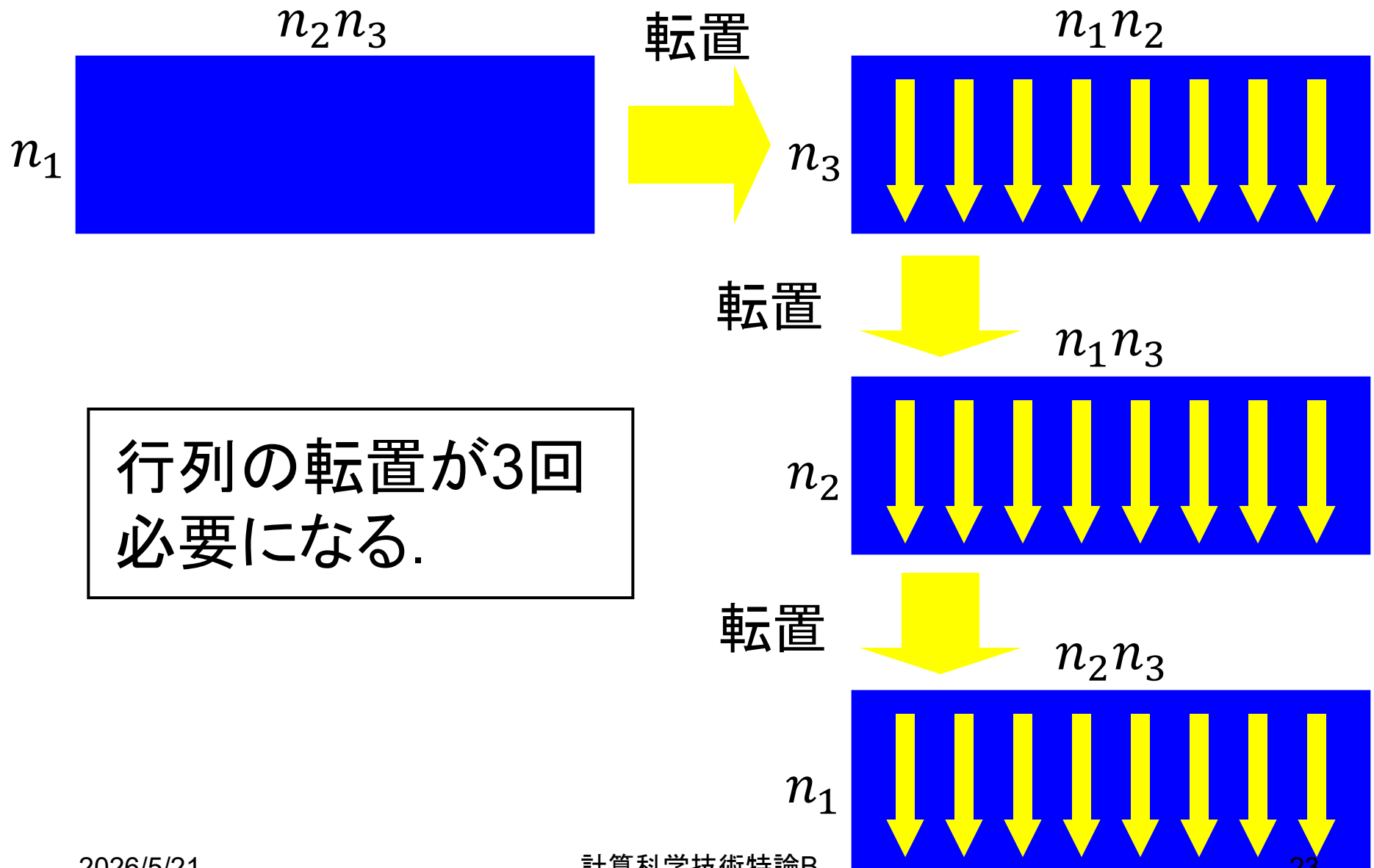
- 行列の転置で用いられているキャッシュ内のデータをmulticolumn FFTでも活用し、キャッシュ内のデータの再利用性を高くする.
- 主記憶からキャッシュにいったんロードしたデータは、できるだけキャッシュに載っているようにする.
- キャッシュ内のデータは再利用できるだけ再利用し、本当にいらなくなった時点で主記憶に書き戻す.
- 配列にパディングを用いて、キャッシュ内の貴重なデータが主記憶に逃げないようにする.

# 三次元FFT

- 三次元離散フーリエ変換 (DFT) の定義

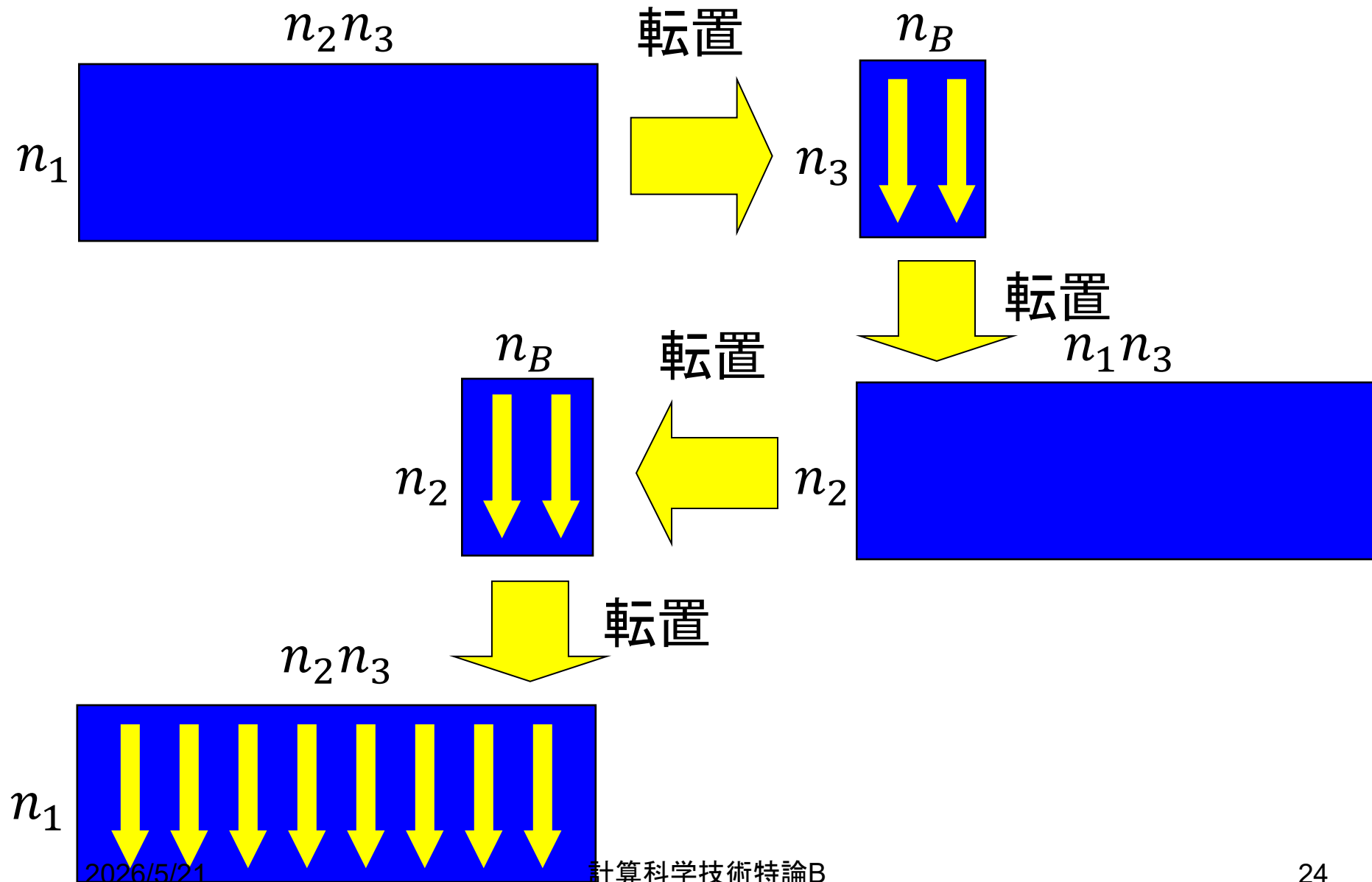
$$y(k_1, k_2, k_3) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} \sum_{j_2=0}^{n_2-1} \sum_{j_3=0}^{n_3-1} x(j_1, j_2, j_3) \omega_{n_3}^{j_3 k_3} \omega_{n_2}^{j_2 k_2} \omega_{n_1}^{j_1 k_1}$$
$$0 \leq k_r \leq n_r - 1, \omega_{n_r} = e^{-2\pi i/n_r}$$

# 通常の三次元FFTアルゴリズム



行列の転置が3回  
必要になる.

# ブロック三次元FFTアルゴリズム



# ブロック三次元FFTの利点

- Cooley-Tukey FFT等の通常のFFTアルゴリズムでは $n = n_1 n_2 n_3$ とすると,
  - 演算回数:  $5n \log_2 n$  (基数2の場合)
  - 主記憶アクセス回数:  $4n \log_2 n$
- ブロック三次元FFTでは
  - 演算回数:  $5n \log_2 n$  (基数2の場合)
  - 主記憶アクセス回数: 理想的には $12n$   
 $n_1 n_2$ 点のデータがキャッシュに入る場合:  $8n$

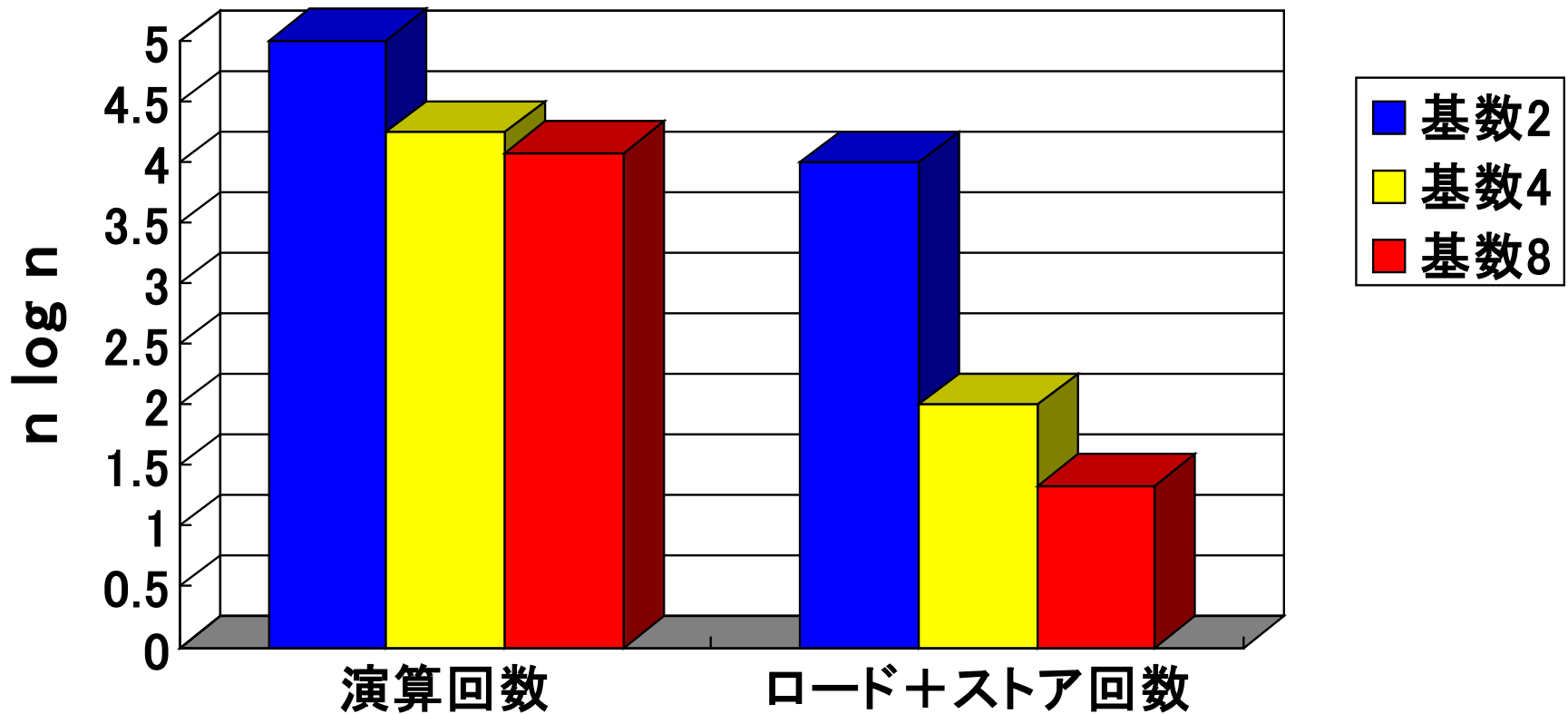
# In-Cache FFTアルゴリズム

- Multicolumn FFTにおいて、各column FFTがキャッシュに載る場合のin-cache FFTとして、
  - Cooley-Tukeyアルゴリズム(ビットリバーズ処理が必要)
  - Stockhamアルゴリズム(ビットリバーズ処理は不要)が考えられる.
- 高い基数のFFTを積極的に用いることにより、メモリアクセス回数を減らす。
  - 基数4, 8のFFTを組み合わせて使用.
  - 基数8よりもメモリアクセス回数の多い、基数4のFFTを最大2ステップに抑えることにより、さらにメモリアクセスを減らす.

# 最内側ループにおける ロード＋ストア，乗算および加算回数

	基数2	基数4	基数8
ロード＋ストア回数	8	16	32
乗算回数	4	12	32
加算回数	6	22	66
総浮動小数点演算回数 ( $n \log_2 n$ )	5	4.25	4.083
浮動小数点演算命令数	10	34	98
浮動小数点演算命令数と ロード＋ストア回数の比	1.25	2.125	3.063

# FFTカーネルを用いた場合の n点FFTの必要演算回数



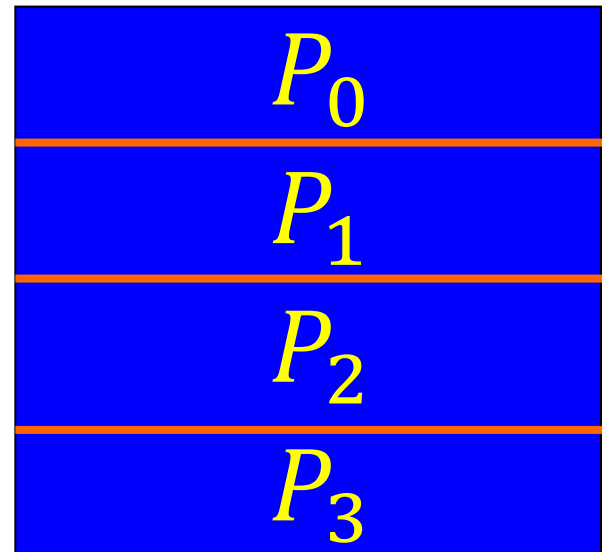
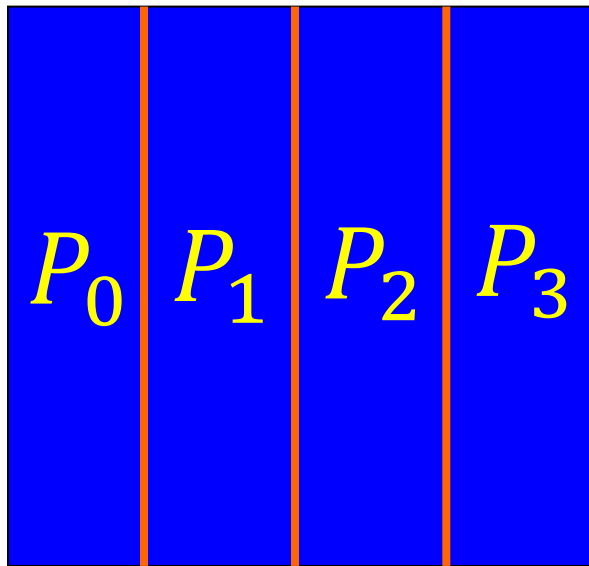
命令回数

計算科学技術特論B

# 並列FFTアルゴリズム

# 配列の分割方法(1/4)

- MPIで並列化を行う際には, 各MPIプロセスで配列を分割して持つようにすると, メモリを節約することができる.
- ブロック分割
  - 連続する領域をノード数で分割



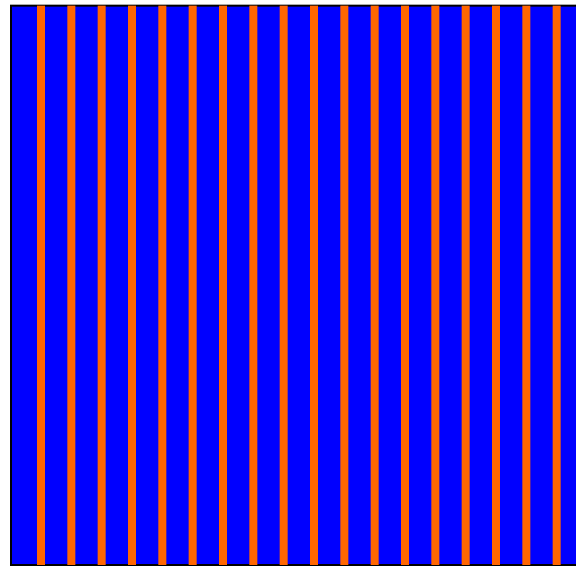
列方向に分割したブロック分割

行方向に分割したブロック分割

# 配列の分割方法(2/4)

- サイクリック分割
  - 1列または1行ごとに分割
  - ブロック分割に比べてロードバランスが取りやすい

0123012301230123...

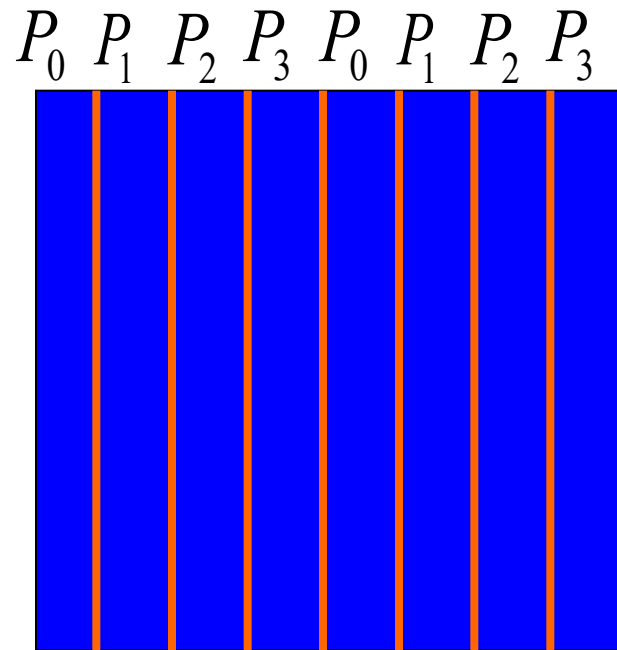


列方向に分割したサイクリック分割

計算科学技術特論B

# 配列の分割方法(3/4)

- ブロックサイクリック分割
  - 複数列または複数行ごとに分割
  - ブロック分割とサイクリック分割の中間

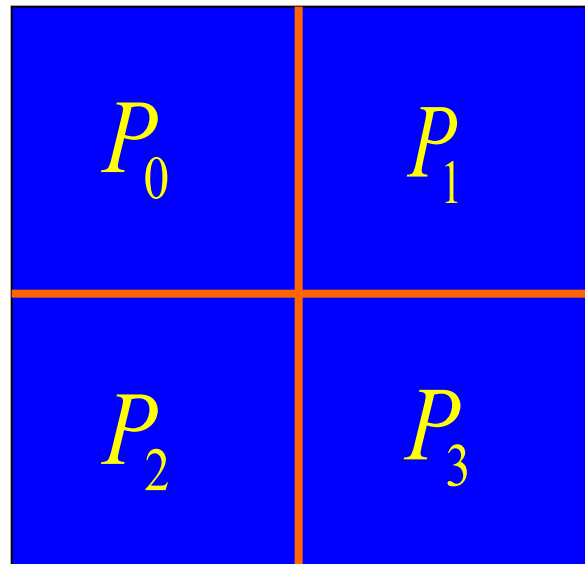


列方向に分割したブロックサイクリック分割

計算科学技術特論B

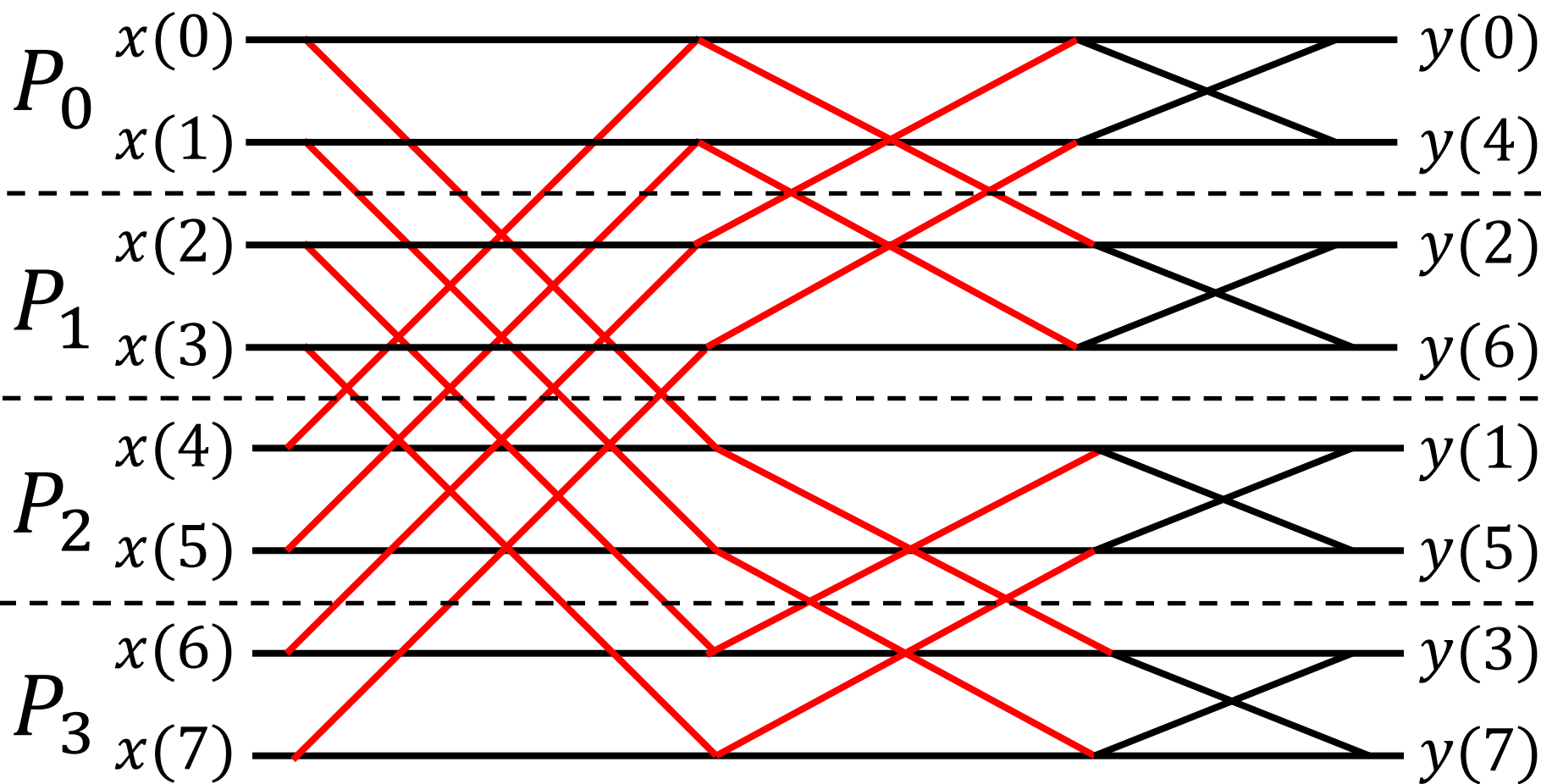
# 配列の分割方法(4/4)

- 二次元分割
  - 行方向と列方向の両方を分割
  - 一次元分割より通信量が減ることがある
  - 二次元のブロック分割, サイクリック分割, ブロックサイクリック分割が考えられる



二次元ブロック分割  
計算科学技術特論B

# Cooley-Tukey FFTの並列化

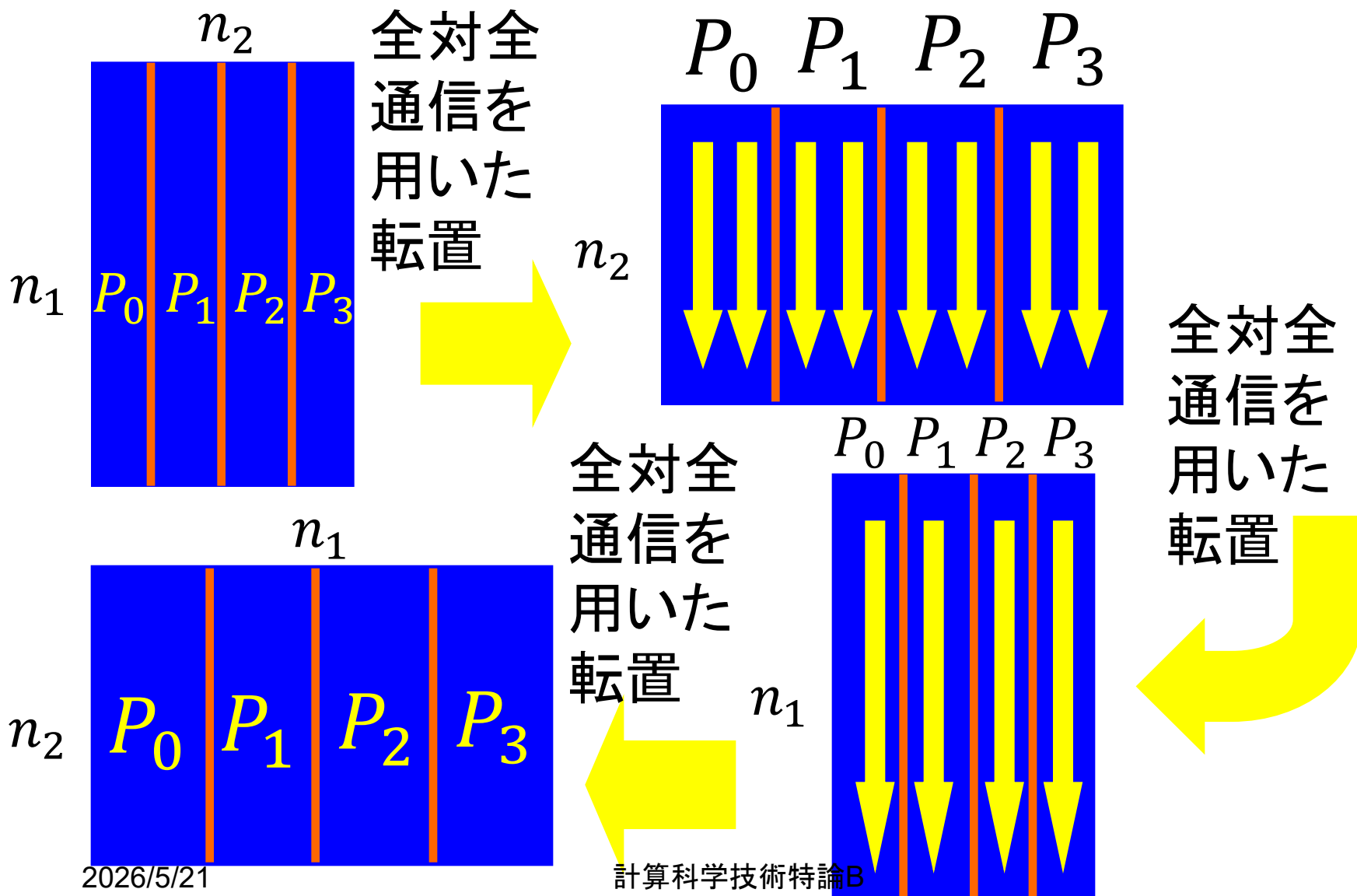


# 並列Cooley-Tukey FFTの通信量

- MPIプロセス数を $P$ とすると, 並列Cooley-Tukey FFTでは,  $\log_2 P$ ステージの通信が必要になる.
- 各ステージでは $n/P$ 個の倍精度複素数データの通信 (MPI\_Send, MPI\_Recv) が行われるため, 合計の通信量は

$$T_{\text{Cooley-Tukey}} = \frac{16n}{P} \log_2 P \text{ (bytes)}$$

# 並列Six-Step FFTアルゴリズム

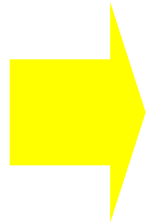


# 全対全通信 (MPI\_Alltoall) を用いた 行列の転置

P0 P1 P2 P3

0	8	16	24
1	9	17	25
2	10	18	26
3	11	19	27
4	12	20	28
5	13	21	29
6	14	22	30
7	15	23	31

全対全  
通信

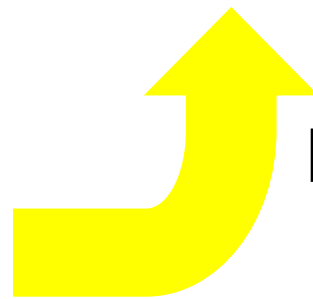


P0 P1 P2 P3

0	2	4	6
1	3	5	7
8	10	12	14
9	11	13	15
16	18	20	22
17	19	21	23
24	26	28	30
25	27	29	31

P0 P1 P2 P3

0 1	2 3	4 5	6 7
8 9	10 11	12 13	14 15
16 17	18 19	20 21	22 23
24 25	26 27	28 29	30 31



MPIプロセス  
内転置

# 並列Six-Step FFTのプログラム例

```
SUBROUTINE PARAFFT(A,B,W,N1,N2,NPU)
COMPLEX*16 A(*),B(*),W(*)
```

C

```
CALL PTRANS(A,B,N1,N2,NPU)
DO J=1,N1/NPU
  CALL FFT2(B((J-1)*N2+1),N2)
END DO
DO I=1,(N1*N2)/NPU
  B(I)=B(I)*W(I)
END DO
CALL PTRANS(B,A,N2,N1,NPU)
DO J=1,N2/NPU
  CALL FFT2(A((J-1)*N1+1),N1)
END DO
CALL PTRANS(A,B,N1,N2,NPU)
RETURN
END
```

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置  
(MPI\_ALLTOALLを使用)  
( $N1/NPU$ )組の $N2$ 点multicolumn FFT

ひねり係数(W)の乗算

$N2 \times N1$ 行列を $N1 \times N2$ 行列に転置  
(MPI\_ALLTOALLを使用)  
( $N2/NPU$ )組の $N1$ 点multicolumn FFT

$N1 \times N2$ 行列を $N2 \times N1$ 行列に転置  
(MPI\_ALLTOALLを使用)

# 並列Six-Step FFTの通信量

- MPIプロセス数を $P$ とすると、並列Six-Step FFTでは、3回の全対全通信が必要になる。
- 全対全通信では、各MPIプロセスは $n/P^2$ 個の倍精度複素数データを、自分以外の $P - 1$  MPIプロセスに送ることになるため、合計の通信量は

$$T_{Six-Step} = 3 \cdot (P - 1) \cdot \frac{16n}{P^2} \text{ (Bytes)}$$

# 並列Cooley-Tukey FFTと 並列Six-Step FFTの通信量の比較

- 並列Cooley-Tukey FFTの通信量

$$T_{Cooley-Tukey} = \frac{16n}{P} \log_2 P$$

- 並列Six-Step FFTの通信量

$$T_{Six-step} = 3 \cdot (P - 1) \cdot \frac{16n}{P^2}$$

- 両社を比較すると,  $P > 8$ の場合には, 並列Six-Step FFTの方が通信量が少なくなる.

# まとめ(1/2)

- ブロックFFTアルゴリズムでは, out-of-core算法の考え方を応用し, オンチップキャッシュを「主記憶」とし, メインメモリを「半導体ディスク」として扱っている.
- キャッシュ内のデータの再利用率を高くすることにより,
  - キャッシュミスを削減.
  - その結果, 主記憶のアクセス回数も削減.
- ブロックFFTアルゴリズムは, プロセッサの演算速度と主記憶のアクセス速度との差が大きい場合に, より効果的.

# まとめ(2/2)

- 並列FFTアルゴリズムでは、問題の領域をどのように分割するかが鍵となる。
  - ブロック分割, サイクリック分割, ブロックサイクリック分割
- 並列FFTでは通信部分は全対全通信が中心となるので、並列化は比較的容易.
- 通信量を削減するだけでなく、ブロック化等を用いたメモリアクセスの局所化も重要となる.