

”三次元 FFT モデル” の数式解説 (“fft_3d.c”)

Open DEM Japan

2025 年 10 月 12 日

本プログラムは周期ポテンシャル計算に必要な三次元高速フーリエ変換を実装する。離散フーリエ変換は

$$\hat{f}_{k_x k_y k_z} = \sum_{n_x=0}^{N_x-1} \sum_{n_y=0}^{N_y-1} \sum_{n_z=0}^{N_z-1} f_{n_x n_y n_z} \exp \left(-2\pi i \left(\frac{k_x n_x}{N_x} + \frac{k_y n_y}{N_y} + \frac{k_z n_z}{N_z} \right) \right) \quad (1)$$

として定義される。分割統治型のアルゴリズムにより計算量は

$$\mathcal{O}(N_x N_y N_z \log(N_x N_y N_z)) \quad (2)$$

に抑えられ、エワルド法や PPPM 法で必要となる逆変換も同一の構造で実現される。通信パターンは軸方向ごとの再配置を伴い、データ局所性が最大化される。