วีระพงษ์ แก้วเทศ 2557: การปรับปรุงสมรรถนะของโปรแกรมจำลองโมเลกุลแบบไดนามิคในระดับซอร์สโค้ด ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมคอมพิวเตอร์) สาขาวิศวกรรมคอมพิวเตอร์ ภาควิชาวิศวกรรมคอมพิวเตอร์ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: อาจารย์ภารุจ รัตนวรพันธุ์, Ph.D. 45 หน้า

โปรแกรม LAMMPS (Steve *et al*., 1990) ซึ่งเป็นโปรแกรมประยุกต์ที่ทำงานเกี่ยวกับการจำลองการเคลื่อนที่ของโมเลกุลแบบไดนามิค ทั้งยังเป็นโปรแกรม ที่ถูกใช้งานอย่างแพร่หลายและเป็นที่นิยม อย่างมากโดยเฉพาะอย่างยิ่งกับนักเรียนและนักศึกษา แต่การทำงานของโปรแกรม LAMMPS นั้นยังติดปัญหาในเรื่องของสมรรถนะในการประมวลผลเพราะใช้เวลาในการประมวลผลนานมากบางครั้งใช้เวลาหลายอาทิตย์เลยทีเดียว ตัวแปลภาษาและสถาปัตยกรรมคอมพิวเตอร์แบบซุปเปอร์สเกลาร์ ในปัจจุบันนี้มีกระบวนในการการเพิ่มสมรรถนะการประมวลผลให้กับโปรแกรมอยู่แล้ว แต่ว่าก็ยังไม่สามารถเพิ่มสมรรถนะได้อย่างเต็มที่เนื่องจากยังติดปัญหาหลายอย่างของสถาปัตยกรรมคอมพิวเตอร์ ซึ่งส่งผลให้สมรรถนะในการประมวลผลโปรแกรมยังไม่ดีเท่าที่ควร วิธีการเพิ่มสมรรถนะให้กับโปรแกรมนั้นมีอยู่ด้วยกันหลากหลายวิธี ซึ่งแต่ละวิธีจะต้องถูกนำไปใช้ในสถานการณ์ที่เหมาะสมตามลักษณะและพฤติกรรมการทำงานของโปรแกรม

งานวิจัยนี้นำเสนอวิธีการแบบต่างๆ เพิ่มสมรรถนะการประมวลผลให้กับโปรแกรม LAMMPS ซึ่งตัวแปลภาษาและสถาปัตยกรรมคอมพิวเตอร์แบบซุปเปอร์สเกลาร์ ไม่สามารถทำให้ได้ จุดประสงค์ของงานวิจัยชิ้นนี้ประกอบด้วย การแสดงให้เห็นว่าเรายังมีโอกาสในการสามารถเพิ่มสมรรถนะของโปรแกรม LAMMPS โดยใช้วิธีง่ายๆ หลังจากเพิ่มสมรรถนะแล้วโปรแกรมยังสามารถทำงานบนเครื่องคอมพิวเตอร์ทั่วๆไป และท้ายสุดงานวิจัยชิ้นนี้ได้อธิบายว่าสาเหตุใดที่ทำให้โปรแกรมไม่สามารถทำงานได้อย่างเต็มสมรรถนะ ผลการทดลองทำให้เห็นว่า งานวิจัยชิ้นนี้สามารถเพิ่มสมถรรนะให้กับ LAMMPS ได้มากกว่างานวิจัยที่ใช้เทคนิคเดียวกัน แต่ว่ายังคงน้อยกว่างานวิจัยที่ใช้เทคนิคพิเศษ ซึ่งงานวิจัยที่ใช้เทคนิคพิเศษจะมีข้อด้อยกว่าคือโปรแกรมที่ใช้เทคนิคพิเศษจะทำงานได้เฉพาะเครื่องที่ทำการปรับปรุงสมรรถนะสำหรับเครื่องเครื่องนั้นเท่านั้น ไม่สามารถนำไป Execute บนเครื่องอื่นๆได้

_____ / / _____

ลายมือชื่อนิสิต ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

ลิขสิทธิ์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์