

## ส่วนที่ 2

รายงานผลการวิจัยฉบับสมบูรณ์  
โครงการวิจัยทุนอุดหนุนวิจัย มก. ปีงบประมาณ 2552

โครงการวิจัยรหัส ว-ท(ด)130.52

การใช้ Open-Sources Software สำหรับวิธี MD-ONIOM โดยการใช้ GPGPU เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการ  
โมเดลให้ดียิ่งขึ้น

(1)วีระมลล์ ไวลิชิต,

(1)Veeramol VAILIKHIT,

---

บทคัดย่อ

การพัฒนาการใช้ GPGPU (General-Purpose computation on Graphics Processing Units) ในตอนแรกเป็นสิ่งใหม่เพื่อที่จะสร้างให้การทำงานเป็นแบบ cluster-like บนคอมพิวเตอร์ส่วนบุคคลเพียงเครื่องเดียว โดยผู้วิจัยได้สามารถเลือกฮาร์ดแวร์ และซอฟต์แวร์ที่เหมาะสม รวมถึงได้พัฒนาการโปรแกรมจนสามารถสร้าง cluster-like บนเครื่องคอมพิวเตอร์สำเร็จ การพัฒนาทางด้านการโปรแกรมเป็นไปอย่างรวดเร็วมาก กลุ่มนักวิจัยอื่นจากต่างประเทศได้มีการใช้ GPU สำหรับการทำโมเดลสิ่งทางเคมีบนโปรแกรมคำนวณได้สำเร็จเช่นกัน

คำสำคัญ :

ABSTRACT

When the application for the KURDI grant was first made, GPGPU (General-Purpose computation on Graphics Processing Units) was a new and emergent field, which allowed cluster-like performance from a single desk-top PC. By the of the grant period, appropriate hardware had been assembled and the CUDA package from Nvidia installed which allowed access to GPU calculations from C++ programs. Constant review of the literature showed what other researchers were doing and help build understanding of what changes were needed to optimise modelling programs to use the GPU.

Key words : GPGPU cluster-like , GPGPU cluster-like

---

(1)ภาควิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ กำแพงแสน

(1)Faculty of Liberal Arts and Science