



เลขที่เอกสาร: 61120095210210000

สวพ-ว-4(1)

ใบนำส่งรายงานวิจัย

เลขที่รับ(สวพ).....

วันที่รับ.....

ขอส่งรายงานวิจัย มก. ประจำปีงบประมาณ (1) 2552

(2) ลักษณะโครงการ เป็นโครงการวิจัยเดี่ยว รหัส ว-ท(ด)130.52 ชื่อโครงการ การใช้ Open-Sources Software สำหรับวิธี MD-ONIOM โดยการใช้ GPGPU เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการโมเดลให้ดียิ่งขึ้น

(3) หัวหน้าโครงการ ผศ.วีรมลล์ ไวลิต

(4) หน่วยงาน ภาควิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ กำแพงแสน

(5) ประเภทโครงการวิจัย โครงการวิจัย 3 สาขา โครงการวิจัยสาขาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี

(6) รายงานที่ส่ง รายงานผลการวิจัยฉบับสมบูรณ์ (ฉบับจริง) จำนวน 3 ชุด พร้อม CD/Diskette 5 แผ่น

(7) การเผยแพร่ผลงานวิจัย ประสงค์ให้ สวพ. เผยแพร่ได้

ลงชื่อ.....

(ผศ.วีรมลล์ ไวลิต)

หัวหน้าโครงการ

16 ก.ย. 2558

ใบรับรายงานวิจัย

เลขที่รับ(สวพ).....

วันที่รับ.....

ขอส่งรายงานวิจัย มก. ประจำปีงบประมาณ (1) 2552

(2) ลักษณะโครงการ เป็นโครงการวิจัยเดี่ยว รหัส ว-ท(ด)130.52 ชื่อโครงการ การใช้ Open-Sources Software สำหรับวิธี MD-ONIOM โดยการใช้ GPGPU เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการโมเดลให้ดียิ่งขึ้น

(3) หัวหน้าโครงการ ผศ.วีรมลล์ ไวลิชิต

(4) หน่วยงาน ภาควิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ กำแพงแสน

(5) ประเภทโครงการวิจัย โครงการวิจัย 3 สาขา โครงการวิจัยสาขาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี

(6) รายงานที่ส่ง รายงานผลการวิจัยฉบับสมบูรณ์ (ฉบับจริง) จำนวน 3 ชุด พร้อม CD/Diskette 5 แผ่น

(7) การเผยแพร่ผลงานวิจัย ประสงค์ให้ สวพ. เผยแพร่ได้

ลงชื่อ.....

(เจ้าหน้าที่สถาบันวิจัยและพัฒนา)

...../...../.....



รายงานผลการวิจัยฉบับสมบูรณ์
ทุนอุดหนุนวิจัย มก.ปีงบประมาณ 2552

รหัสโครงการวิจัย ว-ท(ด)130.52

การใช้ Open-Sources Software สำหรับวิธี MD-ONIOM โดยการใช้ GPGPU เพื่อเพิ่ม
ประสิทธิภาพการโมเดลให้ดียิ่งขึ้น

Use of Open-Sources Software for MD-ONIOM Modelling with Adoption of GPGPU to
Improve Efficiency

หัวหน้าโครงการ ผศ.วีรมลล์ ไวลีชิต

หน่วยงานต้นสังกัด ภาควิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ กำแพงแสน
หน่วยงานหลัก ภาควิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ กำแพงแสน

แหล่งทุน : ทุนอุดหนุนวิจัย มก.

สถาบันวิจัยและพัฒนาแห่งมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

แบบรายงานผลการวิจัยฉบับสมบูรณ์
โครงการวิจัย (Project)
โครงการวิจัยทุนอุดหนุนวิจัย มก. ปีงบประมาณ 2552

ส่วนที่ 1 ข้อมูลโครงการวิจัย

- 1.1 รหัส ว-ท(ด)130.52 ชื่อโครงการวิจัย การใช้ Open-Sources Software สำหรับวิธี MD-ONIOM โดยการใช้ GPGPU เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพการโมเดลให้ดียิ่งขึ้น
- 1.2 ลักษณะโครงการ เป็นโครงการวิจัยเดี่ยว
- 1.3 ชื่อหัวหน้าโครงการ ผศ.วีรมวล วัลลภ
- 1.4 หน่วยงานต้นสังกัด ภาควิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ กำแพงแสน
 หน่วยงานหลัก ภาควิชาวิทยาศาสตร์ คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ กำแพงแสน
- 1.5 ประเภทโครงการ โครงการวิจัย 3 สาขา โครงการวิจัยสาขาวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี
- 1.6 ระยะเวลาดำเนินงานวิจัยตลอดโครงการ 1 ปี ปีงบประมาณ 2552
- 1.7 สถานที่ดำเนินงานวิจัย/เก็บข้อมูล
 - คณะศิลปศาสตร์และวิทยาศาสตร์ วิทยาเขตกำแพงแสน
- 1.8 งบประมาณรวมตลอดโครงการ 210,000.00 บาท ประกอบด้วย
 ปีงบประมาณ 2552 ได้รับ 210,000.00 บาท
- 1.9 วัตถุประสงค์โครงการวิจัย
 1. เพื่อหา open-source softwares ที่เหมาะสมต่อวิธี MD-ONIOM ซึ่งเป็นวิธีที่ถูกใช้ในการสร้างโมเดลของโมเลกุลในตัวทำละลาย
 2. เพื่อพัฒนา software โดยการทำ re-programming เพื่อให้โปรแกรมมีความเหมาะสมและจำเพาะต่อการคำนวณบน high-end 3D-graphics cards โดยการใช้วิธี GPGPU
 3. เพื่อลดค่าใช้จ่ายของการทำ computer modelling
 4. เพื่อสร้าง cluster-like บนเครื่องคอมพิวเตอร์แบบ PC เครื่องเดียว
 5. เพื่อสร้าง modelling system ที่มีความยืดหยุ่นต่อการเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็วของ hardware และ software
- 1.10 เป้าหมายผลงานวิจัยตลอดโครงการ

ปีงบประมาณ	เดือนที่	ผลงานวิจัยที่คาดว่าจะได้
2552	1-6	1. ได้ฮาร์ดแวร์ และ open-source softwares ที่เหมาะสมสำหรับ N \ หรือ ATI graphics cards 2. ทดสอบระบบเพื่อยืนยันยังว่าระบบที่สร้างใ อย่างมีประสิทธิภาพ 3. ร่วมปรึกษากับผู้เชี่ยวชาญ เพื่อหาแนวทางที่ริ

- ประสิทธิภาพที่สุดต่อการดำเนินการด้วยกราฟฟิค การ์ด
- 7-12 1. ร่วมปรึกษากับผู้เชี่ยวชาญในสาขาต่าง ๆ เพื่อหาแนวทางที่มีประสิทธิภาพที่สุดต่อการดำเนินการด้วยกราฟฟิค การ์ด 2. เลือก software code ที่สจะเปลี่ยนและพัฒนาในการดำเนินการบนกราฟฟิค การ์ด โดยเฉพาะอย่างยิ่งส่วนที่ซ้ำที่ซ้ำที่สุดในการคำนวณ 3. พัฒนาระเบียบวิธี MD-ONIOM เพื่อการทำโมเดลลิ่งสำหรับนักวิจัยทั่วไป

1.11 สรุปผลการดำเนินงานวิจัยตลอดโครงการ

- วัตถุประสงค์ (ตามแผน)

- 1.1. หา hardware ที่เหมาะสมสำหรับเครื่องคอมพิวเตอร์แบบ PC รวมถึง CPU, RAM และ video card
2. หา software ที่เหมาะสมสำหรับ N Vidia หรือ ATI graphics cards
3. เลือก open-source software ที่เหมาะสมสำหรับ MD-ONIOM modelling
4. สร้างระบบและทดสอบโดยใช้โมเดลอย่างง่ายเพื่อยืนยันว่า ระบบที่สร้างใช้ได้
5. เลือก software code ที่สนใจที่จะเปลี่ยนและพัฒนาในการดำเนินการบน GPC (graphics card) โดยเฉพาะอย่างยิ่งส่วนที่ซ้ำที่ซ้ำที่สุดในการคำนวณ
6. ร่วมปรึกษากับผู้เชี่ยวชาญในสาขาต่าง ๆ เช่น คณิตศาสตร์ และวิทยาศาสตร์คอมพิวเตอร์ เพื่อหาแนวทางที่มีประสิทธิภาพที่สุดต่อการดำเนินการด้วย graphics card
7. พัฒนา MD-ONIOM software package เพื่อใช้ในการทำ modelling สำหรับนักวิจัยทั่วไป โดยทำ benchmark กับ open-source software ดั้งเดิม รวมถึงทำการหาข้อผิดพลาด (debug)

- เป้าหมาย/ผลที่คาดหวัง (ตามแผน)

- 1.1. ได้ open-source softwares ที่ใช้คำนวณบน high-end 3D-graphics cards ที่เหมาะสมต่อวิธี MD-ONIOM โดยไม่ต้องเสียค่าใช้จ่ายด้าน softwares
2. ลดค่าใช้จ่ายในการทำ computer modelling เพราะเป็นการใช้คอมพิวเตอร์แบบ PC เพียงเครื่องเดียวในการทำ modelling system ที่มีประสิทธิภาพสูง เทียบเท่า cluster computer และสามารถประยุกต์ใช้กับงานวิจัยอื่น ๆ

- ผลการดำเนินงาน (ปฏิบัติได้จริง)

- 1.1. ได้ hardware ที่เหมาะสมสำหรับเครื่องคอมพิวเตอร์แบบ PC รวมถึง CPU, RAM และ video card
2. ได้ software ที่เหมาะสมสำหรับ N Vidia หรือ ATI graphics cards
3. เลือก open-source software ที่เหมาะสมสำหรับ MD-ONIOM modelling
4. สร้างระบบและทดสอบโดยใช้โมเดลอย่างง่ายเพื่อยืนยันว่า ระบบที่สร้างใช้ได้

5. เลือก software code ที่สนใจที่จะเปลี่ยนและพัฒนาในการดำเนินการบน GPC (graphics card) โดยเฉพาะอย่างยิ่งส่วนที่ช้าที่สุดในการคำนวณ

6. ร่วมปรึกษากับผู้เชี่ยวชาญในสาขาต่าง ๆ เช่น คณิตศาสตร์ และวิทยาศาสตร์คอมพิวเตอร์ เพื่อหาแนวทางที่มีประสิทธิภาพที่สุดต่อการดำเนินการด้วย graphics card

1.12 ผลการดำเนินงานวิจัยเป็นไปตามแผนหรือไม่ อย่างไร

- เปลี่ยนแปลงจากแผนดำเนินงานที่เสนอไว้

เนื่องจากการพัฒนาการโปรแกรม GPGPU สำหรับการทำโมเดลเชิงทางเคมีพัฒนาไปอย่างรวดเร็วในระยะเวลาช่วงที่มีการขอรับ และได้รับการสนับสนุนทุนวิจัย ทำให้วัตถุประสงค์ของงานวิจัย และความคาดหวังแต่เดิมกลายเป็นเรื่องปกติธรรมดาสำหรับการโปรแกรม เพราะกลุ่มวิจัยอื่นจากต่างประเทศที่เป็นผู้พัฒนาโปรแกรมคำนวณได้มีการพัฒนาการโปรแกรม GPGPU สำหรับการใช้โปรแกรมคำนวณอย่างต่อเนื่อง

1.13 ปัญหา อุปสรรคในการดำเนินงาน และแนวทางแก้ไข

มีปัญหาและอุปสรรคด้านปัจจัยการวิจัย

- งบประมาณวิจัย เนื่องจากการพัฒนาการโปรแกรมสำหรับการทำโมเดลเชิงทางเคมีพัฒนาไปอย่างรวดเร็วมาก การพิจารณาการได้รับทุนวิจัยไม่ทันต่อการเปลี่ยนแปลง ทำให้ไม่สามารถทำการพัฒนาการโปรแกรมได้ทันกับกลุ่มวิจัยอื่นในต่างประเทศ

แนวทางการแก้ไข

--

1.14 สรุปผลการดำเนินงานตามวัตถุประสงค์

- บรรลุบางส่วน (ร้อยละ 80) เหตุผล วัตถุประสงค์สุดท้ายของงานวิจัยที่จะพัฒนาระเบียบวิธี การทำ benchmark และการหาข้อผิดพลาดไม่สามารถทำได้ทันกลุ่มนักวิจัยอื่นในต่างประเทศ

1.15 ผลผลิต/สิ่งที่ได้จากการวิจัย (Outputs)

- สร้างนักวิจัย/สนับสนุนนิสิตปริญญาตรี (ระบุจำนวนคน)

2

1.16 จุดเด่นของผลงานวิจัย / ผลผลิต / สิ่งที่ได้จากการวิจัย (outputs)

- สร้างองค์ความรู้ใหม่/นวัตกรรมที่ทันสมัย

1.17 การนำผลการวิจัยไปใช้ประโยชน์ (Outcomes)

1. การนำผลการวิจัยไปเผยแพร่/ถ่ายทอด

1.1 วารสารวิชาการระดับชาติ/วารสารวิชาการระดับนานาชาติ 1 เรื่อง

ตีพิมพ์ในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ

- ผู้แต่ง : Veeramol VAILIKHIT, Wilhelm HOLZSCHUH, Supa HANNONGBUA

- ชื่อเรื่อง : 1-H-NMR Chemical Shifts of Some DMSO-Solvated Amines Using MD-ONIOM2

ชื่อวารสาร : Journal of Molecular Structure: THEOCHEM

- ปีที่ตีพิมพ์ : 2553 เดือน: มีนาคม ถึง มีนาคม เล่มที่ : 944 ฉบับที่ : 13 หน้า : 173 ถึง 176

1.2 นำเสนอในการประชุม/สัมมนาในระดับชาติและนานาชาติ

-

1.3 เผยแพร่ผลงานในรูปแบบการจัดนิทรรศการ

-

1.4 บทความ

-

1.5 จัดอบรมถ่ายทอด

-

1.6 นำเสนอทางสื่อผสม

-

1.7 ภาครัฐนำไปใช้กำหนดแผน/นโยบาย

-

1.9 อื่นๆ

-

2. เป้าหมายการนำผลลัพธ์ / ผลสำเร็จที่ได้ / หรือคาดว่าจะได้จากการวิจัยไปใช้ประโยชน์

1. ด้านการศึกษา/เสริมการเรียนการสอน

- หวังว่าจะนำไปสู่การเปิดสอนวิชาทางด้าน advanced computer programming สำหรับนิสิตสาขาวิทยาศาสตร์ต่อไป

2. ด้านการถ่ายทอดเทคโนโลยี/ฝึกอบรมแก่กลุ่มเป้าหมาย

- 1. พัฒนา MD-ONIOM software package เพื่อใช้ในการทำ modelling สำหรับนักวิจัยทั่วไป โดยทำ benchmark กับ open-source software ดั้งเดิม รวมถึงทำการหาข้อผิดพลาด (debug)

2. พัฒนาการใช้คอมพิวเตอร์แบบ PC เพียงเครื่องเดียวในการทำ modelling system ที่มีประสิทธิภาพสูง และสามารถประยุกต์ใช้กับงานวิจัยอื่น ๆ

3. ก่อให้เกิดความร่วมมือระหว่างหน่วยงาน/การสร้างเครือข่าย

- ความร่วมมือ และบริการระหว่างหลายสาขา เช่น คณิตศาสตร์ วิทยาศาสตร์คอมพิวเตอร์ เคมี และวิทยาศาสตร์สาขาอื่น ๆ

4. นำความรู้ไปวิจัย/พัฒนาขั้นต่อไป

- สามารถพัฒนาให้เป็น โปรแกรมและคอมพิวเตอร์ที่มีประสิทธิภาพ และประหยัด รวมถึงใช้งานได้ทั่ว

ไป ในขั้นต่อไป

1.18 ผลกระทบ (Impact) ที่เกิดจากการนำผลการวิจัยไปใช้ สอดคล้องกับยุทธศาสตร์ด้านใด

- ยุทธศาสตร์การบริหารราชการแผ่นดิน (พ.ศ.2548 - 2551)

1 . ยุทธศาสตร์การพัฒนาคุณภาพคนและสังคมไทยสู่สังคมแห่งภูมิปัญญาและการเรียนรู้

เป้าประสงค์ การพัฒนาคนให้มีคุณธรรมนำความรู้ เกิดภูมิคุ้มกัน

2 . ยุทธศาสตร์การปรับโครงสร้างเศรษฐกิจให้สมดุลและยั่งยืน

เป้าประสงค์ การสร้างภูมิคุ้มกันของระบบเศรษฐกิจ

3 . ยุทธศาสตร์การสร้างความเข้มแข็งของชุมชนและสังคมให้เป็นรากฐานที่มั่นคงของประเทศ

เป้าประสงค์ การสร้างความมั่นคงของเศรษฐกิจชุมชน

4 . ยุทธศาสตร์การพัฒนาบนฐานความหลากหลายทางชีวภาพและการสร้างความมั่นคงของฐานทรัพยากรและสิ่งแวดล้อม

เป้าประสงค์ การรักษาสถานทรัพยากรและความสมดุลของระบบนิเวศน์

5 . ยุทธศาสตร์การเสริมสร้างธรรมาภิบาลในการบริหารจัดการประเทศ มุ่งเสริมสร้างความเป็นธรรมในสังคมอย่างยั่งยืน

เป้าประสงค์ เสริมสร้างความเข้มแข็งของภาคประชาชน ให้สามารถเข้าร่วมในการบริหารจัดการประเทศ

- นโยบายและยุทธศาสตร์การวิจัยของชาติ(พ.ศ.2551 - 2553)

ยุทธศาสตร์การวิจัยที่ 5 การบริหารจัดการความรู้ ผลงานวิจัย ทรัพยากร และภูมิปัญญาของประเทศสู่การใช้ประโยชน์ด้วยยุทธวิธีที่เหมาะสม

กลยุทธ์การวิจัยที่ 2 การวิเคราะห์และประเมินผลเพื่อการพัฒนาศักยภาพและความสามารถด้านการวิจัยของประเทศที่มีประสิทธิภาพ

แผนงานวิจัยที่ 1 การวิจัยเกี่ยวกับระบบการวิเคราะห์และประเมินผลเพื่อการพัฒนาศักยภาพและความสามารถด้านการวิจัยของประเทศที่มีประสิทธิภาพ

1.19 การรับความคุ้มครองทรัพย์สินทางปัญญา

-

1.20 การได้รับรางวัล

-

1.21 งานที่จะทำต่อไป

--

1.22 คำชี้แจงเพิ่มเติม

- ได้แนบรายงานความก้าวหน้าการดำเนินงานโครงการวิจัย (Project) ตามหัวข้อในส่วนที่ 2 มาด้วยโดย

1.23 ได้แนบรายงานผลการวิจัยฉบับสมบูรณ์ของโครงการ (Project) ตามหัวข้อในส่วนที่ 2 มาด้วยแล้ว

ลงชื่อ.....หัวหน้าโครงการ

(ผศ.วีรมวลส์ ไวลีขิต)

16 ก.ย. 2558

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