ชื่อเรื่องการค้นคว้าแบบอิสระ ระบบอินเตอร์เฟสสำหรับการจำลองพลวัตระดับโมเลกุล ผ่านเว็บ

ผู้เขียน ว่าที่ร้อยตรี ภาณุ ปิ่นมาศ

ปริญญา วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต (วิทยาการคอมพิวเตอร์)

คณะกรรมการที่ปรึกษาการค้นคว้าแบบอิสระ

อาจารย์ ดร.จีรยุทธ ไชยจารุวณิช ประธานกรรมการ

อาจารย์ ดร.วรรณจันทร์ แสงหิรัญ กรรมการ

บทคัดย่อ

การจำลองพลวัตระดับโมเลกุล เป็นเครื่องมือมาตรฐานในการตรวจสอบ วิเคราะห์ข้อมูลต่างๆ ทางเคมี โดยเป็นเครื่องมือที่สามารถแสดงผลในขอบเขตที่ใกล้เคียงกับความเป็นจริงมากที่สุด รวมทั้งเงื่อนไขต่างๆในระบบและช่วงเวลาของการทดสอบที่มากขึ้น

โปรแกรมสำหรับการจำลองพลวัตระดับโมเลกุลนั้น ในปัจจุบันมีอยู่หลายโปรแกรมด้วยกัน เช่น AMBER, CHARMM, NAMD, GROMOS and GROMACS อย่างไรก็ตาม การใช้งานโปรแกรมเหล่านี้ส่วนใหญ่จะอยู่ในรูปแบบที่เรียกว่า Text Mode และมีการใช้งานโดยการป้อนคำสั่งทีละบรรทัด (Command line) ซึ่งทำให้ยากต่อการใช้งาน

งานค้นคว้าอิสระเชิงวิทยานิพนธ์นี้มีเป้าหมายเพื่อลดความยุ่งยาก และขั้นตอนที่สลับซับซ้อนของการใช้โปรแกรม ซึ่งโปรแกรม AMBER ได้ถูกเลือกเพื่อใช้ในการจำลองพลวัตระดับโมเลกุล เนื่องจากเป็นโปรแกรมที่ค่อนข้างมีประสิทธิภาพและมีเสถียรภาพในการทำงาน และนิยมใช้กันอย่างแพร่หลาย โดยสร้างระบบอินเตอร์เฟสผ่านเว็บบราวเซอร์ เพื่อให้ผู้ใช้งานสามารถทำการจำลองพลวัตระดับโมเลกุลได้สะดวกยิ่งขึ้น และหลังจากที่ระบบได้ทำการจำลองพลวัตระดับโมเลกุลแล้ว ระบบยังสามารถแจ้งข้อความไปยังผู้ใช้งานผ่านทางอิเล็กทรอนิกส์เมล์ด้วย

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright © by Chiang Mai University
All rights reserved

Independent Study Title Interface System for Molecular Dynamic Simulations via Web

Author Acting SubLt. Phanu Pinmas

Degree Master of Science (Computer Science)

Independent Study Advisory Committee

Lecturer Dr. Jeerayut Chaijaruwanich Chairperson

Lecturer Dr. Vannajan Sanghiran Member

ABSTRACT

The Molecular Dynamic Simulation has become a standard tool for the investigation of biomolecules. Simulation are performed of ever bigger system using more realistic boundary conditions and setter sampling due to longer sampling times

There are many tools available for Molecular Dynamic Simulation such as AMBER, CHARMM, NAMD, GROMOS and GROMACS. However, most of them are not user friendly and the calculations perform using command line or text mode.

This research focused on reducing the complexity of molecular dynamic simulation process of comercial software. AMBER program is chosen for this research since it is a popular and reliable molecular dynamic simulation by running the calculation through the interface system via web. After the calculation process was done, the user will be notifying by e-mail.

ลิขสิทธิ์มหาวิทยาลัยเชียงใหม่
Copyright © by Chiang Mai University
All rights reserved