



PUBLICATION INTERNE

A parallel BSO Metaheuristic for Molecular Docking problem

Hocine SAADI
Malika MEHDI
Nadia NOUALI

Septembre 2018

03 Rue des Frères Aissou – Ben Aknoun – ALGER – ALGERIE
Tél. : 021 91 62 05 à 08 – Fax : 021 91 21 26
[http : //www.cerist.dz](http://www.cerist.dz)

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



PUBLICATION INTERNE

A parallel BSO Metaheuristic for Molecular Docking problem

Hocine SAADI
Malika MEHDI
Nadia NOUALI

Septembre 2018

03 Rue des Frères Aissou – Ben Aknoun – ALGER – ALGERIE
Tél. : 021 91 62 05 à 08 – Fax : 021 91 21 26
[http : //www.cerist.dz](http://www.cerist.dz)

Prénom **Hocine SAADI**

A parallel BSO Metaheuristic for Molecular Docking problem

Identificateur du rapport : ISRN CERIST-DTISI/RR-18-00000006 – dz

Nom de l'organisme responsable DTISI/ CERIST

Date de publication : 12/09/2018

Résumé :

Dans ce rapport, nous proposons un modèle parallèle d'une métaheuristique basée sur l'essaim d'abeilles (BSO) pour résoudre le problème de Docking moléculaire. Cette solution est basée sur le modèle MapReduce, nous utilisons le framework MapCG pour implémenter ce modèle sur les cartes de traitement graphique GPUs .

MapCG a été développé pour simplifier le processus de programmation sur GPUs et pour concevoir des applications portables indépendamment de l'architecture matérielle.

Notre solution peut fonctionner séquentiellement sur un CPU, ou en parallèle sur GPUs sans changer le code. Les expériences lors de docking d'un de complexes protéine-ligand montrent que notre solution atteint une bonne performance. l'implémentation parallèle utilisant MapCG sur GPU gagne une accélération moyenne de 10x par rapport à un seul CPU.

Mots clés: BSO; Calcul Parallèle; GPUs; MapReduce ; MapCG

RÉSUMÉ.....	3
1 INTRODUCTION.....	5
2 BACKGROUND	6
2.1. MapReduce	
2.2. MapCG	
3.3. Introduction to BSO Bees Swarm Optimization	
3 METHODOLOGY.....	8
4 Conclusion	8
5 References	8