République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene
Faculté d'Informatique
Département des Systèmes Informatiques (SIQ)
Mémoire de Master
Filière : Informatique
Spécialité : High Performance Computing (HPC)

Thème : Parallélisation de la métaheuristique BSO-DOCK sur processeur graphique GPU avec OpenACC

Encadré par :
Mr. Hocine Saadi
Mme. Malika Mehdi

Présenté par :
Sonia Zemmour

Membre du Jury :
Mr. Ahmed Riadh Baba Ali
Mme. Karima Bouibede

Soutenu le :
XX/06/2024

Projet : HPC_005 / 2024

Dédicace

À la jeune Sonia de 18 ans, qui avait fait son premier pas à l'USTHB en octobre 2019,
YOU DID IT .

Remerciements

Tout d'abord, je loue Allah Tout-Puissant, pour m'avoir accordé la force et la persévérance nécessaires pour mener à bien ce travail.

Mes sincères remerciements vont à Monsieur Riadh Ahmed Baba Ali et Madame Karime Bouibede, membres éminents du jury, pour leur engagement et leur volonté d'évaluer mon travail.

Je suis particulièrement reconnaissante envers Monsieur Hocine Saadi et Madame Malika Mehdi, mes encadrants dévoués, pour leur soutien infaillible, leur patience et leur encouragement constant tout au long de ce travail. Leur expertise et leurs orientations ont été cruciales pour orienter mes efforts dans la bonne direction.

Je souhaite également exprimer ma profonde reconnaissance envers mes chers parents, ainsi qu'à mes sœurs aimantes, Nadia et Lynda. Leur amour indéfectible, leurs sacrifices et leur soutien sans faille ont été ma source de force et de motivation tout au long de ce parcours académique.

Enfin, je tiens à remercier toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce travail.

Résumé

Dans les domaines de la bioinformatique et de la chimie computationnelle, le docking moléculaire est une technique essentielle pour prédire la position et l'orientation d'une molécule (ligand) lorsqu'elle interagit avec une protéine cible. Cette méthode est cruciale pour la découverte de médicaments, l'étude des mécanismes moléculaires et la compréhension des interactions biomoléculaires à l'échelle atomique. Cependant, la nature NP-difficile du docking moléculaire présente des défis computationnels importants. Ce projet explore l'utilisation de l'optimisation par essaim d'abeilles (Bee Swarm Optimization, BSO) et sa parallélisation avec OpenACC sur les accélérateurs (comme les GPU) pour relever ces défis. L'objectif est de déterminer dans quelle mesure la parallélisation sur GPU réduit le temps d'exécution par rapport aux implémentations séquentielles.

- **Mots-clés :** docking moléculaire, bioinformatique, , optimisation par essaim d'abeilles, BSO, OpenACC, parallélisation GPU.

Abstract

In the fields of bioinformatics and computational chemistry, molecular docking is a critical technique for predicting the position and orientation of a molecule (ligand) when it interacts with a target protein. This method is crucial for drug discovery, studying molecular mechanisms, and understanding biomolecular interactions at the atomic scale. However, the NP-hard nature of molecular docking poses significant computational challenges. This project explores the use of Bee Swarm Optimization (BSO) and its parallelization with OpenACC for accelerators like GPUs to address these challenges. The goal is to determine to what extent GPU parallelization reduces execution time compared to sequential implementations.

- **Keywords :** molecular docking, bioinformatics, Bee Swarm Optimization, BSO, OpenACC, GPU parallelization.

Table des matières

Listes des figures

Listes des tableaux

Liste des algorithmes

Liste des abréviations

- **ACO** : Ant Colony Optimization
- **AMD** : Advanced Micro Devices
- **API** : Application Programming Interface
- **ARM** : Advanced RISC Machines (ou Architecture ARM)
- **BSO** : Bee Swarm Optimization
- **CUDA** : Compute Unified Device Architecture
- **DLSS** : Deep Learning Super Sampling
- **DM** : Docking Moléculaire
- **GPU** : Graphics Processing Unit
- **GPGPU** : General-Purpose Graphics Processing Unit
- **GCC** : GNU Compiler Collection
- **HCC** : Heterogeneous Compute Compiler
- **HPC** : High-Performance Computing
- **IA** : Intelligence Artificielle
- **MIMD** : Multiple Instruction, Multiple Data
- **MISD** : Multiple Instruction, Single Data
- **NP** : Non-deterministic Polynomial
- **OpenACC** : Open Accelerators
- **OpenCL** : Open Computing Language
- **OpenMP** : Open Multi-Processing
- **PGI** : The Portland Group

- **PSO** : Particle Swarm Optimization
- **RT** : Ray Tracing
- **SIMD** : Single Instruction, Multiple Data
- **SISD** : Single Instruction, Single Data
- **SM** : Streaming Multiprocessor
- **SPMD** : Single Program, Multiple Data
- **UAL** : Unité Arithmétique et Logique
- **VLSI** : Very-Large-Scale Integration