

**Computación Cuántica
Facultad de Ingeniería
Universidad de Antioquia
2025-1**

**Práctica No. 2
Aplicación en la Bioinformática**

Realización: En parejas.

Fecha de Entrega: Miércoles **30 de abril** del 2025.

Valor: 10%

Introducción: Una de las mayores aplicaciones en la bioinformática es la comparación de cadenas de *strings* provenientes de secuencias genéticas de DNA y RNA. Dicha comparación corresponde a un caso particular del reconocimiento de una secuencia de caracteres ASCII en un determinado alfabeto, según la Teoría de Lenguajes¹.

En esta práctica de laboratorio utilizaremos las bondades de la superposición, la reversibilidad cuántica y operaciones con observables cuánticos, para comparar múltiples secuencias de caracteres provenientes de la secuenciación genética de diferentes microorganismos y especies biológicas.

1. Análisis de un ejemplo de comparación de cadenas genéticas en Qiskit

1.1. Analice el Tutorial de **Qiskit** denominado “*Comparing Strings with Quantum Superposition*”, compartido en el siguiente enlace de **Github**:

https://github.com/gpatigno/QC_2025/blob/main/LAB/PR2/String_Comparison_Qiskit2.0.ipynb

1.2. Explique el modo utilizado en este tutorial para representar cuánticamente las tres secuencias de *strings* asociadas a los códigos genéticos del *Yeast*, *Protozoan* y *Bacterial*.

- Explique de qué manera se usa la superposición cuántica para representar dichos *strings*.

1.3. En sus propias palabras explique la función **encode_bitstring()**, así como las instrucciones más relevantes de esta función.

1.4. Explique la necesidad de invertir cada uno de los tres circuitos cuánticos creados para las tres secuencias de *strings* que son comparadas en este tutorial.

¹ https://courses.engr.illinois.edu/cs373/sp2009/lectures/lect_02.pdf

- Presente un ejemplo matemático del proceso de inversión utilizado en este código para comparar las secuencias de *strings*.
- ¿De qué manera se evidencia la **reversibilidad cuántica** en la comparación entre las secuencias de *strings* dadas? **Explique.**

2. Fidelidad Cuántica

2.1. Realice el estudio del concepto de **fidelidad cuántica** descrito en el siguiente documento disponible en **Microsoft Teams**, a fin de entender qué componentes intervienen en la medición de esta fidelidad, cómo se realiza su cálculo, y cuáles son los operadores cuánticos requeridos:

<https://surl.ms/K7d>

2.2. Estudie el código presentado en **Github** con la implementación de los ejemplos indicados, a fin de identificar el **observable cuántico** requerido para calcular dicha fidelidad cuántica:

https://github.com/gpatigno/QC_2025/blob/main/LAB/PR2/Fidelidad Cuantica 2025.ipynb

3. Comparación de secuencias genéticas de diversos animales

Modifique el código en Python del Tutorial analizado en la **Sección 1** de la página anterior, a fin de comparar cuatro de las secuencias genéticas dadas en la siguiente página, referentes a múltiples especies biológicas (humano, chimpancé, ratón, conejo, cerdo, oveja, vaca, entre otros):

<https://old-ib.bioninja.com.au/standard-level/topic-3-genetics/31-genes/sequences.txt>

3.1. Como parte de esta modificación, elabore un programa en **Qiskit** que analice y compare entre sí, **cuatro secuencias genéticas diferentes** escogidas por usted entre aquellas mostradas en dicha página. Observe que, a diferencia del tutorial analizado en la **Sección 1**, las secuencias genéticas ahora indicadas corresponden a *strings* compuestos por los nucleótidos² “A”, “C”, “G”, y “T”³.

- Dado su entendimiento de la función `encode_bitstring()` estudiada en el **ítem 1.3** de esta guía, ¿cuántos *qubits* requiere ahora para representar sus cuatro secuencias genéticas escogidas?

² <https://www.genome.gov/es/genetics-glossary/Nucleotido>

³ A: Adenina, C: Citosina, G: Guanina, T: Timina.

- De estos *qubits*, ¿cuántos se requieren para el direccionamiento o posición de cada carácter alfanumérico, y cuántos para representar cada carácter almacenado? **Explique.**
 - Presente y explique su representación de cada secuencia genética escogida, como un **estado cuántico** de n *qubits*.
- 3.2. En su nuevo código desarrollado, modifique el ciclo **For** del **bloque 13** del código original compartido, e implemente el cálculo de la similaridad entre secuencias genéticas como un cálculo de la fidelidad entre los estados cuánticos de cada secuencia genética, según lo estudiado en la **Sección 2** de esta guía.
- Dado el número de *qubits* de su circuito cuántico, indique la expresión matemática del **observable cuántico** requerido para implementar el cálculo de la fidelidad cuántica entre las diferentes secuencias genéticas.
 - Para su implementación en **Qiskit** de la medida de fidelidad cuántica, considere el uso de la instrucción **SparsePauliOp()**, y de la primitiva **StatevectorEstimator()** a fin de definir y medir el observable requerido, siguiendo la estructura lógica del código compartido en la **Sección 2** de esta guía⁴.
- 3.3. Como una prueba del buen funcionamiento de su nuevo programa, presente el resultado de similaridad de una de las secuencias genéticas consigo misma.
- Luego modifique sólo uno de los nucleótidos de la cadena genética dada, y realice su comparación con la secuencia genética original. Determine la similaridad entre ambas cadenas genéticas.
- 3.4. Obtenga una representación a nivel de compuertas cuánticas, de sus circuitos cuánticos de comparación de secuencias genéticas.
- Explique los componentes de cada circuito.
- 3.5. Presente los resultados de las cuatro comparaciones escogidas por usted, y determine el grado de similaridad genética entre las diferencias especies biológicas.
- 3.6. Personalice su código tanto como le sea posible, y agregue comentarios y explicaciones propios en **español**.

⁴ En caso de requerir, solicite asesoría del profesor del curso para llevar a cabo esta implementación en **Qiskit**.

4. **Informe**

4.1. Presente una sustentación en persona de todo el trabajo llevado a cabo en esta práctica de laboratorio.

4.2. Realice su informe con su respuesta a las preguntas indicadas en la presente guía de laboratorio.

- Presente los detalles de ejecución de su código desarrollado para comparar las secuencias genéticas escogidas de diferentes animales.
- Indique su análisis e interpretación de cada resultado obtenido en el presente laboratorio.
- Dentro de este análisis, evalúe la diferencia entre la ejecución del ejemplo dado en el Tutorial del **Qiskit**, y su nuevo programa realizado para sus secuencias genéticas escogidas.
- Adjunte a este informe un archivo **zip** con los códigos escritos y “pantallazos” de cada ejecución realizada.
- Presente conclusiones, y bibliografía utilizada para realizar este informe.