Interfaz Cuántico-Biomédica para el Diagnóstico Temprano de Enfermedades Neurodegenerativas

Alex C. Díaz Universidad Nacional Andrés Bello Junio 2025

¡Bienvenid@s al corazón del proyecto científico del futuro!

Motivación

En un mundo donde los diagnósticos tardíos son una barrera para una intervención eficaz, nuestro proyecto nace desde la convicción de que la ciencia puede acortar esa espera. Las enfermedades neurodegenerativas como el Alzheimer afectan a millones de personas, deteriorando progresivamente su memoria, autonomía y calidad de vida.

Lo que queremos cambiar es el tiempo. El tiempo que tarda un diagnóstico. El tiempo que toma entender lo que ocurre a nivel molecular. El tiempo que puede significar una vida más digna.

Además, esta motivación es también personal: el Alzheimer ha tocado a mi familia, como a tantas otras. Transformar ese dolor en propósito es la chispa que impulsa este proyecto.

Queremos construir una herramienta interdisciplinaria que fusione computación cuántica, fotónica, y biología para detectar patrones invisibles a simple vista, y convertirlos en información útil, comprensible y, sobre todo, accesible.

Fundamentos Cuánticos A

La computación cuántica se basa en principios fundamentales de la mecánica cuántica. Estos principios nos permiten representar, manipular y explorar información de formas imposibles con una computadora clásica.

Superposición Un qubit puede estar en varios estados a la vez.

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

Es como una moneda girando: está en cara y sello al mismo tiempo, hasta que la detenemos.

Entrelazamiento Dos qubits entrelazados comparten información instantáneamente. Ejemplo clásico:

$$\left|\Phi^{+}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|00\right\rangle + \left|11\right\rangle)$$

Cambiar uno, cambia el otro, sin importar la distancia.

Bit vs Qubit Un bit clásico es 0 o 1. Un qubit puede ser ambos a la vez gracias a la superposición.

Esfera de Bloch Es una forma de visualizar cualquier estado cuántico como un punto sobre la superficie de una esfera tridimensional.

Comp puertas Cuánticas Son transformaciones que aplicamos a los qubits. Algunas importantes:

• Hadamard (H): crea superposición:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

- CNOT (CX): entrelaza dos qubits.
- RZ(): gira el estado del qubit en torno al eje Z.

Glosario Visual

- Qubit: unidad básica de información cuántica.
- Bit clásico: unidad de información binaria: 0 o 1.
- Superposición: un qubit puede estar en 0 y 1 a la vez.
- Entrelazamiento: conexión profunda entre dos qubits.

- Esfera de Bloch: representación visual del estado de un qubit.
- Hamiltoniano: operador que describe la energía de un sistema cuántico.
- Ising Model: modelo que simula interacciones entre partículas (usado aquí para simular proteínas).
- VQE (Variational Quantum Eigensolver): algoritmo para encontrar la energía más baja (estado base) de un sistema cuántico.
- Circuito cuántico: conjunto de compuertas que transforman qubits.

Modelo de Ising y Simulación Proteica

El modelo de Ising fue creado para describir sistemas magnéticos, pero es increíblemente versátil. Podemos usarlo para representar cómo las partes de una proteína interactúan entre sí.

Hamiltoniano 1D sin campo:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} Z_i Z_j$$

- J: constante de acoplamiento. Si J > 0, los qubits tienden a alinearse.
- Z_i : operador de Pauli-Z en el qubit i.
- $\langle i, j \rangle$: suma sobre vecinos.

¿Por qué sirve para proteínas?

- Cada qubit representa una parte de la cadena de la proteína (como un aminoácido).
- Las interacciones entre qubits imitan cómo las partes de una proteína se influencian al plegarse.
- ullet Encontrar el mínimo energético o simula el plegamiento más estable.

Ejemplo de interacción:

$$Z_i Z_j |00\rangle = +1 |00\rangle, \quad Z_i Z_j |01\rangle = -1 |01\rangle$$

Circuito Cuántico en Qiskit

Para implementar el modelo de Ising en Qiskit, usamos un circuito simple pero potente:

Componentes del circuito:

1. Hadamard (H) \rightarrow crea superposición:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

- 2. CX (CNOT) \rightarrow entrelaza dos qubits.
- 3. $\mathbf{RZ}(\) \to \mathrm{aplica}$ una rotación de fase:

$$R_Z(\theta) = e^{-i\theta Z/2}$$

4. Mediciones \rightarrow colapsan el estado y nos dan resultados observables.

Diagrama básico del circuito:

¿Qué hace este circuito?

- Simula una interacción $Z_i Z_j$.
- Codifica la energía del sistema.
- Es base para el algoritmo VQE.

Algoritmo VQE y Aplicaciones Médicas 👽

El algoritmo VQE busca la **energía más baja** del sistema (estado fundamental), lo cual representa la **configuración más estable de la proteína**.

¿Cómo funciona VQE?

1. Se define un **ansatz** (una familia de circuitos con parámetros).

- 2. El circuito genera el estado $\left|\psi(\vec{\theta})\right\rangle$.
- 3. Se calcula el valor esperado del Hamiltoniano:

$$E(\vec{\theta}) = \left\langle \psi(\vec{\theta}) \middle| H \middle| \psi(\vec{\theta}) \right\rangle$$

4. Un optimizador clásico ajusta $\vec{\theta}$ para minimizar E.

¿Por qué usamos VQE?

- Funciona en hardware cuántico actual (NISQ).
- Reduce profundidad del circuito.
- Es robusto al ruido.
- Permite encontrar la energía de equilibrio sin simular toda la función de onda.

Ejemplo de ansatz:

$$|\psi(\theta)\rangle = RY(\theta_1) \cdot CX \cdot RY(\theta_2) |00\rangle$$

Optimizar θ_1 , θ_2 minimiza la energía del sistema.

Aplicación Clínica: Diagnóstico Temprano V

La estructura de ciertas proteínas como β -amiloide está involucrada en enfermedades como el Alzheimer. Detectar errores en su plegamiento puede anticipar síntomas antes de que se manifiesten clínicamente.

Nuestra propuesta:

- Utilizar computación cuántica para simular el plegamiento de segmentos de proteína.
- ullet Detectar configuraciones con energía inestable o biomarcadores tempranos.
- Integrar resultados con una interfaz médica clínica que visualice los patrones simulados y sugiera acciones.

¿Por qué es útil para la medicina?

- Acelera el tiempo de diagnóstico.
- Reduce el costo de pruebas invasivas o de laboratorio.
- Abre la puerta a medicina personalizada con enfoque molecular.

Propuesta de Interfaz Médico-Cuántica

Proponemos crear una interfaz accesible para centros médicos que:

Incluya:

- Una simulación en tiempo real de la energía de plegamiento para cada proteína modelo.
- Comparación automática con una base de datos de proteínas sanas vs. alteradas.
- Visualización accesible para profesionales médicos (colores, alertas, reporte PDF).

Potenciales beneficios:

- Tiempo de diagnóstico más rápido (< 24h con datos previos).
- Priorización de pacientes con señales tempranas.
- Herramienta complementaria a resonancias magnéticas y biomarcadores.

Reflexión Interdisciplinaria e Interseccional

La física cuántica nos muestra que el universo está profundamente entrelazado.

Del mismo modo, creemos que una visión **interdisciplinaria e interseccional**—que conecte ciencia, arte, neurodiversidad y tecnología— permite resolver problemas de forma más creativa y eficaz.

Beneficios de este enfoque:

- Amplía el rango de soluciones posibles.
- Fortalece la empatía en proyectos de salud.
- Nos invita a pensar fuera de los límites de una sola disciplina.

Como neurodivergente, esta visión no es solo académica: es una herramienta para sanar, colaborar y construir tecnología con propósito.

Proyecciones Futuras 🗣

Fase 1 — Simulación Cuántica Proteica (2025):

- Desarrollar código funcional en Qiskit.
- Ajustar modelo de Ising a secuencias de péptidos reales.

Fase 2 — Interfaz Clínica (2025–26):

- Crear prototipo de plataforma médico-cuántica.
- Testeo con datos simulados y estructura en Python/Streamlit.

Fase 3 — Integración Biofotónica (2026):

- Incluir señales ópticas/neurales en el análisis (UPEs).
- Estudiar coherencia cuántica en proteínas como tubulina.

Fase 4 — Publicación y Extensión (2027):

- Artículo académico de código abierto.
- Expansión a diagnósticos para Parkinson, Huntington.

Datos Curiosos de Neurofotónica 🖓

- El cerebro emite fotones espontáneamente: ultraweak photon emissions (UPEs), posibles marcadores de actividad cuántica neuronal.
- Algunas proteínas neuronales como triptófano mantienen coherencia cuántica a temperatura corporal (¡37 °C!).
- Teorías como Orch-OR sugieren que los microtúbulos podrían funcionar como qubits biológicos.
- ¡La fotónica cuántica podría ser clave en entender la consciencia!

Preguntas Frecuentes Esperadas (Q&A) Q

Q: ¿No es demasiado especulativo usar computación cuántica en medicina?

A: Hoy es exploratorio, pero los avances en hardware y algoritmos lo hacen viable a corto plazo.

Q: ¿Por qué usar el modelo de Ising? A: Es simple, robusto y captura la interacción entre elementos binarios como espines o plegamientos.

Q: ¿Cómo se valida clínicamente esto? A: Con bases de datos públicas como PDB y colaboración con laboratorios médicos para comparación.

Q: ¿Podría aplicarse a otras enfermedades? A: Sí, especialmente Parkinson, priones, y otras con proteínas mal plegadas como base.

Referencias

Referencias

- [1] M. A. Nielsen, I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge Univ. Press, 2000.
- [2] A. Aspect et al. Experimental Tests of Bell's Theorem. Phys. Rev. Lett., 1981.
- [3] A. Perdomo-Ortiz et al. A variational eigenvalue solver on a quantum processor. *Nature Comm.*, 2014.
- [4] V. Salari et al. Quantum Processes in Neurophotonics. Progress in Neurobiology, 2020.
- [5] T. Karzig et al. Topological quantum computation with Majorana modes. *Phys. Rev.* B, 2021.
- [6] J. Al-Khalili, J. McFadden. Life on the Edge: Quantum Biology. Broadway Books, 2015.
- [7] R. Penrose, S. Hameroff. Orch-OR theory of consciousness. Math. Comput. Simul., 1996.
- [8] Qiskit Team. https://qiskit.org/
- [9] IBM Quantum. https://quantum-computing.ibm.com/

Resumen del Proyecto (Español)

Este proyecto propone el diseño de una interfaz médico-cuántica capaz de simular el plegamiento de proteínas asociadas a enfermedades neurodegenerativas, como el Alzheimer, utilizando computación cuántica.

A través del modelo de Ising y el algoritmo VQE implementado en Qiskit, se busca

encontrar configuraciones de mínima energía que representen estados moleculares estables o críticos. Esta metodología permitiría un diagnóstico más temprano y accesible, integrando además elementos de neurofotónica para explorar posibles correlaciones entre procesos ópticos neuronales y coherencia cuántica.

El enfoque es interdisciplinario, accesible y propone una ciencia que entrelaza física, computación y biología con impacto social.

Abstract (English)

We propose a quantum-based biomedical interface designed to simulate the folding dynamics of proteins linked to neurodegenerative diseases, such as Alzheimer's.

Using the 1D Ising model and the Variational Quantum Eigensolver (VQE) algorithm implemented in Qiskit, our system aims to determine low-energy conformations that may correspond to key biomarkers.

Additionally, we explore neurophotonics and the role of ultraweak photon emissions (UPEs) as potential indicators of quantum coherence in the brain.

This project integrates quantum computing, biology and optics under an accessible and interdisciplinary framework to support early diagnostics and reduce healthcare costs.