

Diseño de una Interfaz Clínico-Cuántica

Simulación Proteica en Qiskit para el Diagnóstico Temprano de Alzheimer

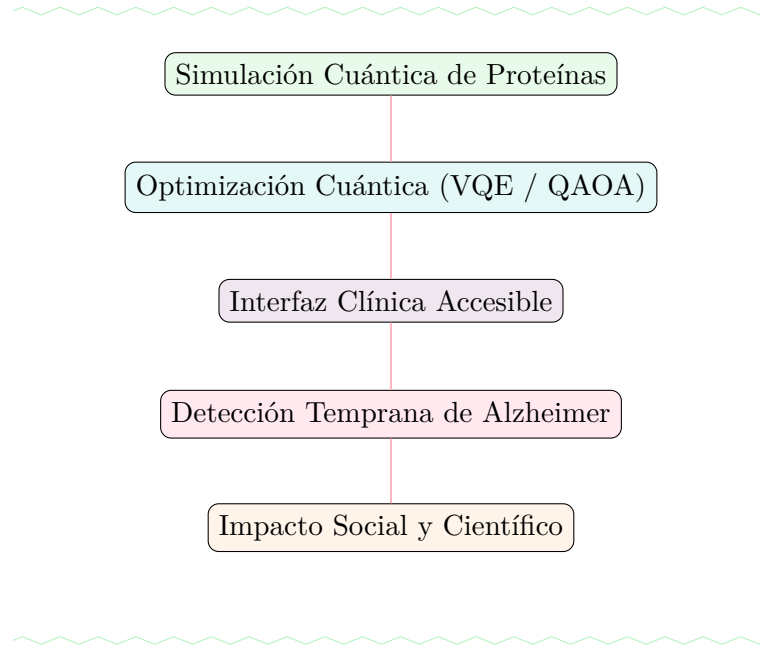
Alex C. Díaz

Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional Andrés Bello

26 de abril de 2025

Resumen

Se presenta una propuesta de simulación cuántica basada en el modelo de Ising como herramienta para modelar plegamiento de proteínas implicadas en enfermedades neurodegenerativas. A través de Qiskit, se pretende construir un sistema accesible que permita acelerar diagnósticos mediante un modelo híbrido clínico-cuántico. La propuesta integra un enfoque interdisciplinario, tecnológico y social.



1. Introducción

El Alzheimer representa uno de los desafíos médicos más importantes del siglo XXI. Diversos estudios vinculan su aparición con el mal plegamiento de proteínas como la beta-amiloide. Este trabajo propone un enfoque innovador basado en computación cuántica para explorar configuraciones energéticas estables e inestables del plegamiento proteico, como un camino hacia el diagnóstico temprano.

2. Fundamentos conceptuales

Qubit: unidad mínima de información cuántica que puede estar en superposición.

Modelo de Ising: modelo físico que representa interacciones entre partículas vecinas.

Hamiltoniano: define la energía del sistema: $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} Z_i Z_j$.

VQE: algoritmo de optimización para hallar la energía mínima.

Qiskit: framework de IBM para programar simulaciones cuánticas.

3. Propuesta del sistema clínico-cuántico

Se propone una interfaz compuesta por cuatro módulos:

1. Módulo de simulación cuántica (modelo de Ising en Qiskit).
2. Módulo de optimización (VQE).
3. Módulo de visualización biomédica (Streamlit).
4. Módulo de integración clínica (futuro): datos UPEs / patrones de expresión.

El sistema se orienta a exploración de configuraciones patológicas antes de manifestación clínica.

4. Metodología paso a paso

1. Instalar Python 3.10 y Qiskit.
2. Crear circuito con compuertas Hadamard, CX y RZ.
3. Aplicar modelo de Ising y medir el sistema.
4. Ejecutar algoritmo VQE para encontrar mínimos de energía.
5. Mostrar resultados en Streamlit.
6. Prototipar conexión con señales biomédicas.

5. Impacto biomédico y clínico

La posibilidad de predecir estructuras incorrectas en proteínas antes del desarrollo del Alzheimer permitiría desarrollar alertas tempranas y tratamientos personalizados. Esto conlleva una reducción de tiempo, costo y sufrimiento, democratizando el acceso al diagnóstico.

6. Futuro y colaboración

Este proyecto está abierto a colaboración multidisciplinaria: neurocientíficxs, desarrolladorxs, expertxs en computación cuántica y comunidades médicas. Promovemos una ciencia diversa, accesible y conectada al bienestar humano.

Roadmap del Proyecto

- **Fase 1 (2025):** Profundización teórica, entrenamiento en Qiskit, estudio de algoritmos VQE y simulación de proteínas simples.
- **Fase 2 (2025-2026):** Desarrollo de prototipo funcional de la interfaz cuántica-clínica, pruebas internas de simulaciones.
- **Fase 3 (2026):** Ampliación del modelo a otras proteínas relacionadas con Alzheimer. Simulación de interacciones proteicas más complejas.
- **Fase 4 (2026-2027):** Validación preliminar en colaboración con equipos médicos, publicación de primeros resultados.
- **Fase 5 (Futuro):** Expansión a otras enfermedades neurodegenerativas, integración con tecnologías de IA y biofotónica.

Contribuciones Originales y Diferenciación ★

Este proyecto presenta varias características que lo distinguen en el panorama actual de investigación cuántica y biomédica:

- **Enfoque clínico-práctico:** No sólo busca simular plegamientos proteicos, sino desarrollar una interfaz accesible y amigable para equipos clínicos, acercando la computación cuántica al diagnóstico médico real.
- **Aplicación a diagnóstico temprano:** Enfocado directamente en el Alzheimer, con la visión de extenderse a otras enfermedades neurodegenerativas en el futuro.
- **Integración de señales biomédicas emergentes:** Explora la posibilidad de correlacionar simulaciones cuánticas con emisiones de fotones ultra débiles (UPEs) cerebrales como nuevos biomarcadores.

- **Perspectiva interseccional e interdisciplinaria:** Desde su concepción, el proyecto promueve la colaboración entre física, biomedicina, ingeniería, arte y ciencias sociales, reconociendo que los problemas complejos requieren soluciones diversas.
- **Motivación humana profunda:** Inspirado en experiencias personales con el Alzheimer, el proyecto combina rigor científico con un fuerte compromiso ético y social.
- **Visión de futuro expansible:** El enfoque modular de la interfaz permitirá aplicar esta metodología a otras patologías relacionadas con el plegamiento proteico y ampliar su impacto global.

Con estas bases, nuestro proyecto busca no solo aportar al avance de la ciencia, sino también construir puentes entre el conocimiento y la humanidad.

Referencias

- Penrose, R. & Hameroff, S. (1996). Orch OR theory.
- Al-Khalili, J. & McFadden, J. (2015). Life on the Edge.
- Qiskit documentation: <https://qiskit.org/>
- IBM Quantum: <https://quantum-computing.ibm.com/>
- Microsoft Quantum: <https://azure.microsoft.com/en-us/solutions/quantum-computing/>