

Simulación Cuántica de Sistemas Biológicos Simples: El Modelo de Ising en Qiskit

Alex C. Díaz

Universidad Nacional Andrés Bello, 2025

13 de abril de 2025

(^_^)/ ¡Bienvenidxs al laboratorio del futuro! \(^ ^*)

Resumen Q

Este proyecto investiga cómo la computación cuántica puede aplicarse a la biomedicina para modelar sistemas biológicos simples, como el comportamiento de proteínas, con el fin de reducir costos y tiempos de diagnóstico y tratamiento. Además, se integra una visión interdisciplinaria y diversa que une ciencia, arte y sociedad [3].

Conceptos Técnicos

Superposición: Estado cuántico en el que un sistema (como un qubit) existe en varios estados posibles al mismo tiempo. Solo al medirlo se “colapsa” a uno de esos estados. Es como una moneda girando en el aire: está en cara y cruz a la vez, hasta que cae y se decide.

Entrelazamiento (entanglement): Fenómeno cuántico en el que dos o más qubits quedan “conectados” de tal forma que conocer el estado de uno nos da información instantánea sobre el otro, sin importar cuán lejos estén. Es como si dos dados lanzados en distintos países siempre sumaran 7.

Bit: Unidad fundamental de información en computación clásica. Solo puede tener uno de dos valores posibles: 0 o 1, como si fuera un interruptor que está apagado o encendido.

Qubit (bit cuántico): La versión cuántica del bit clásico. Un qubit no solo puede estar en 0 o 1, sino también en una combinación de ambos al mismo tiempo gracias al principio de superposición. Esto le permite procesar muchas más posibilidades de forma simultánea.

Medición cuántica: Proceso mediante el cual se observa o se extrae información de un qubit. La medición hace que el qubit colapse de su estado superpuesto a un estado definido (0 o 1). Esta acción destruye la superposición, por lo que no se puede “ver sin afectar”.

Puerta lógica (compuerta cuántica): Operación que modifica el estado de un qubit, similar a cómo en computación clásica una compuerta lógica AND u OR transforma bits. En el caso cuántico, las compuertas pueden crear superposición, entrelazamiento o rotar fases.

Compuerta Hadamard (H): Convierte un qubit en superposición. Por ejemplo, transforma un estado $|0\rangle$ en una mezcla equilibrada de $|0\rangle$ y $|1\rangle$. Es la primera operación en muchos algoritmos cuánticos porque permite que el qubit explore múltiples caminos.

Compuerta CX o CNOT (control-NOT): Si el qubit de control está en estado $|1\rangle$, invierte (flipa) el estado del qubit objetivo. Es fundamental para generar entrelazamiento entre qubits, una herramienta clave para operaciones cuánticas complejas.

Compuerta RZ: Aplica una rotación en el eje Z de la esfera de Bloch (representación gráfica del estado de un qubit). Modifica la “fase” del qubit, un parámetro que no se puede ver directamente, pero que afecta cómo se combinan las probabilidades al final del circuito.

Qiskit: Plataforma de programación desarrollada por IBM para diseñar, simular y ejecutar circuitos cuánticos. Permite usar tanto simuladores clásicos como computadores cuánticos reales a través de la nube.

Modelo de Ising: Modelo físico que describe cómo interactúan una serie de espines (representados como qubits) entre sí. En computación cuántica se usa para simular problemas de física estadística, magnetismo y biología, como el plegamiento de proteínas.

Hamiltoniano: Es una función matemática que describe la energía total de un sistema cuántico. A partir del Hamiltoniano se puede predecir cómo evoluciona el sistema en el tiempo o cuál es su estado de energía más estable.

Algoritmo VQE (Variational Quantum Eigensolver): Algoritmo híbrido (usa computador clásico + cuántico) para encontrar la energía mínima de un sistema. Ideal para problemas donde se quiere saber cuál es la configuración más estable, como en moléculas o proteínas.

Algoritmo QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm): Sirve para resolver problemas de optimización, como encontrar la mejor solución entre muchas opciones. Usa circuitos cuánticos que exploran diferentes caminos en paralelo, buscando la mejor configuración posible con menos recursos.

Medición de probabilidades: Después de correr un circuito cuántico muchas veces (shots), se obtienen estadísticas sobre qué estados aparecen más. Esto genera un histograma de frecuencias que ayuda a interpretar el resultado del experimento cuántico.

Del Modelo de Ising a la Proteína

El modelo de Ising, utilizado originalmente para estudiar interacciones magnéticas, se adapta para simular el plegamiento de proteínas. Cada qubit es como una ficha de dominó con dos estados (arriba o abajo); las interacciones entre ellas determinan el "pliegue" de la proteína, similar a cómo diferentes combinaciones de fichas crean patrones únicos [1].

Ecuación de Hamiltoniano

La energía total del sistema se describe con:

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

Interpretación de los parámetros:

- H : Energía total del sistema.
- J : Constante de acoplamiento, que indica la fuerza y dirección (positiva o negativa) de la interacción entre qubits (piensa en la fuerza entre imanes).
- Z_i : Operador de Pauli-Z en el qubit i , que al medirse toma valores de ± 1 (simbolizando estados "arriba" o "abajo").
- $\sum_{\langle i,j \rangle}$: Suma sobre todos los pares de qubits vecinos.

Esta ecuación es clave para determinar la configuración de mínima energía utilizando algoritmos como VQE [1, 5].

Implementación en Qiskit

El circuito cuántico se construye en tres pasos:

Preparación: Se aplican compuertas Hadamard a cada qubit para obtener el estado $|+++ \rangle$, iniciando el sistema en superposición (ver sección Conceptos Técnicos).

Interacción: Se implementan compuertas CX y RZ para simular acoplamientos del modelo de Ising entre qubits, similar a ensamblar un rompecabezas molecular.

Medición: Se mide el sistema para generar un histograma con las configuraciones más estables obtenidas tras la evolución cuántica.

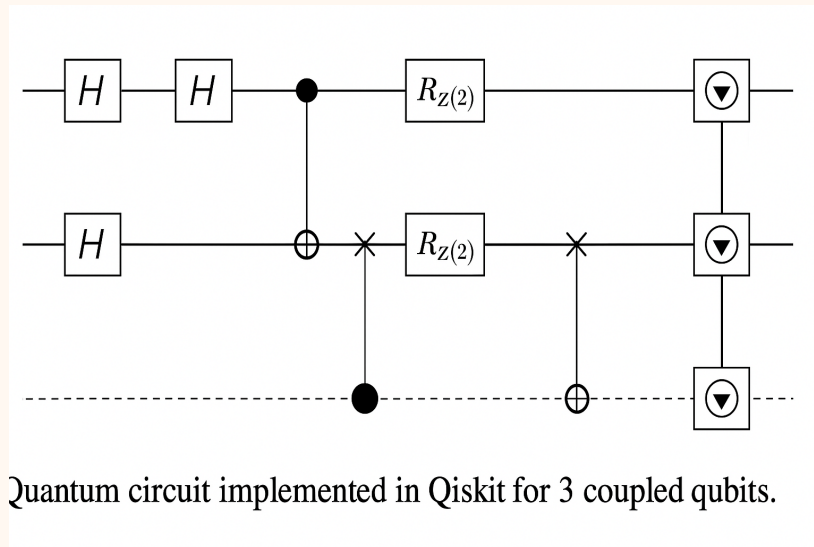


Figura 1: Circuito cuántico en Qiskit para 3 qubits acoplados.

Descripción: Se utilizan compuertas Hadamard, CX y RZ para simular interacciones del tipo ZZ, representando el modelo de Ising en un sistema de proteínas.

El circuito cuántico utilizado para simular el modelo de Ising con tres qubits se representa en la Figura 1. Cada línea horizontal corresponde a un qubit (q_0, q_1, q_2). Al inicio, se aplican compuertas Hadamard (marcadas con “H”) para colocar los qubits en un estado de superposición, permitiendo explorar múltiples configuraciones a la vez.

Posteriormente, se aplican compuertas de interacción: las compuertas CX (controladas) y RZ (rotaciones de fase), que simulan las interacciones ZZ del modelo de Ising entre pares de qubits. Estas interacciones representan, de forma abstracta, las relaciones

entre segmentos de una proteína durante su plegamiento.

Finalmente, el circuito termina con compuertas de medición, donde se lee el estado final de cada qubit. Estas mediciones permiten generar un histograma con las configuraciones más probables del sistema, revelando patrones de comportamiento que podrían asociarse a configuraciones estables o inestables en un sistema biológico simulado.



De la Simulación al Diagnóstico Médico Ψ

Simular el plegamiento de proteínas es como contar con un mapa digital que indica dónde se producen defectos críticos, esencial para enfermedades como el Alzheimer.

Beneficios:

- **Reducción de costos:** Permite reemplazar costosos ensayos de laboratorio con simulaciones.
- **Diagnóstico acelerado:** Identifica rápidamente configuraciones inestables.
- **Tratamientos personalizados:** Adapta terapias en función de la simulación de comportamientos moleculares específicos.

Esta aproximación puede revolucionar el proceso de diagnóstico y la investigación biomédica [3].



Teorías de la Conciencia Cuántica

Las teorías de Penrose y Hameroff (Orch OR) sugieren que la consciencia puede originarse en procesos cuánticos dentro de microtúbulos neuronales.

Imagina que la mente es como una gran orquesta, donde cada neurona es un instrumento afinado. La computación cuántica sería como un micrófono multidimensional

capaz de captar no solo cada sonido, sino también las resonancias entre ellos, revelando armonías que una simple escucha clásica no podría detectar. Aunque es un campo controvertido, esta idea amplía el horizonte, sugiriendo que la mecánica cuántica no solo es la base de la materia, sino también de la consciencia [1].

Proyecciones Futuras 🚀

- Ampliar la simulación a proteínas completas utilizando más qubits.
- Aplicar algoritmos de optimización cuántica (VQE, QAOA) para hallar la configuración energética óptima.
- Desarrollar herramientas colaborativas que integren diversas disciplinas para acelerar diagnósticos y tratamientos.
- Explorar la aplicación de la computación cuántica en la modelación de la actividad cerebral, enlazando biomedicina y teorías de la consciencia.

Visión Interconectada del Mundo 🌐

La física cuántica nos muestra que el universo está intrínsecamente entrelazado. Adoptar una visión interconectada significa que la colaboración entre disciplinas; ciencia, arte, tecnología, ciencias sociales, entre otras, no solo enriquece la perspectiva, sino que mejora la eficacia en la resolución de problemas. Al integrar diversidad de experiencias y saberes, se amplía el campo de posibilidades, permitiendo identificar patrones más rápido, proponer soluciones más creativas y evitar puntos ciegos.

Es como una red neuronal viva: cada nodo aporta algo único, y su interacción fortalece el conjunto.

Reflexión Final ♥

Este proyecto demuestra que la unión de la física cuántica y la biomedicina puede transformar la forma en que diagnosticamos y tratamos enfermedades, reduciendo costos y acelerando resultados.

Al integrar disciplinas de forma diversa, construimos un futuro interconectado en el que cada perspectiva enriquece el conocimiento y la innovación, abriendo caminos para abordar desafíos globales de manera colaborativa.

(*^o^*)¡Gracias por acompañarnos en este viaje transformador!

Referencias 📖

- [1] Penrose, R. & Hameroff, S. (1996). Orchestrated reduction of quantum coherence in brain microtubules: A model for consciousness. *Mathematics and Computers in Simulation*, 40(3-4), 453–480.
- [2] Penrose, R. (1994). *Shadows of the Mind: A Search for the Missing Science of Consciousness*. Oxford University Press.
- [3] Al-Khalili, J. & McFadden, J. (2015). *Life on the Edge: The Coming of Age of Quantum Biology*. Broadway Books.
- [4] IBM Quantum. (n.d.). Retrieved from <https://quantum-computing.ibm.com/>
- [5] Qiskit documentation. (n.d.). Retrieved from <https://qiskit.org/>