

IBM Quantum

Hackathon Prompt: Cleveland Clinic.



Antecedentes y motivación

Predecir la estructura tridimensional de una proteína a partir de su secuencia de aminoácidos sigue siendo un desafío fundamental en biología molecular. Si bien los métodos basados en IA, como AlphaFold, han logrado un éxito notable, a menudo presentan dificultades con secuencias que carecen de homólogos estructurales conocidos. Los enfoques de modelado libre basados en la física ofrecen, en principio, mayor precisión, pero resultan computacionalmente prohibitivos en hardware clásico.

La computación cuántica ofrece un enfoque fundamentalmente diferente. Al combinar algoritmos cuánticos con modelos de red de grano grueso, que discretizan las estructuras proteicas en representaciones simplificadas, los procesadores cuánticos pueden explorar eficientemente el vasto panorama conformacional de las proteínas. Sin embargo, la elección del modelo de red influye significativamente en la precisión y los recursos necesarios. Las redes tetraédricas son eficientes, pero demasiado rígidas para modelar estructuras secundarias clave. En cambio, las redes cúbicas centradas en las caras (FCC) proporcionan una mayor fidelidad geométrica, lo que permite patrones de plegamiento más realistas, como hélices α y láminas β , aunque con un mayor coste de recursos cuánticos.

Tu desafío es diseñar un algoritmo cuántico para la predicción de la estructura de proteínas utilizando un modelo de red 3D de tu elección, aprovechando al máximo las capacidades del hardware cuántico actual de IBM (Eagle R3, Heron R2). Explora más allá de las redes tetraédricas y cúbicas centradas en las caras (FCC), incluyendo posibilidades como la red cúbica centrada en el cuerpo (BCC), redes híbridas personalizadas y otras, para equilibrar el realismo biológico con la eficiencia cuántica.

Para empezar:

- Crea un algoritmo cuántico que prediga la estructura plegada de una proteína corta (5-10 aminoácidos) minimizando un hamiltoniano que codifique los términos de energía y las restricciones estructurales en la red 3D elegida. Usa Qiskit para la codificación.
- Codificar el plegamiento de la proteína usando codificaciones de red basadas en giros o coordenadas.
- Construir hamiltonianos que consideren las energías de interacción (p. ej., hidrofóbica-polar, Miyazawa-Jernigan)...Cómo comenzar:

IBM Quantum

Recursos sugeridos:

- IBM: <https://www.ibm.com/quantum/qiskit>
- Repositorio: <https://github.com/qiskit-community/quantum-protein-folding>
- Error Mitigation and Suppression Techniques Documentation: <https://quantum.cloud.ibm.com/docs/es/tutorials/probabilistic-error-amplification>

Criterios propuestos de evaluación del proyecto:

1. Aspectos técnicos (30 puntos)

- Complejidad del algoritmo cuántico
- Nivel de optimización
- Escalabilidad de la arquitectura
- Accesibilidad y facilidad de uso
- Uso del SDK de Qiskit y herramientas asociadas

2. Originalidad y unicidad (25 puntos)

- Nivel de innovación
- Interés y novedad del proyecto
- Desafíos técnicos abordados

3. Utilidad y complejidad (25 puntos)

- Utilidad práctica del proyecto
- Diseño funcional
- Aplicabilidad en escenarios reales
- Potencial de expansión futura

4. Presentación (20 puntos)

- Claridad de exposición
- Explicación de decisiones
- Participación del equipo
- Narrativa coherente