**NOMBRE DEL SUB-EVENTO**

**VII SIMPOSIO INTERNACIONAL DE CIENCIAS FARMACÉUTICAS**

**Título**

**OBTENCIÓN DE MODELOS QSAR PARA LA PREDICCIÓN DE ACTIVIDAD CONTRA BACTERIAS DEL TIPO GRAM-POSITIVO**

***Title***

***OBTAINING QSAR MODELS FOR THE PREDICTION OF ACTIVITY AGAINST GRAM-POSITIVE BACTERIA***

**Laritza Bergues Morales1, Argenis A Soutelo Jiménez2, Julio A Rojas Vargas3, Julio C Escalona Arranz4**

1-Laritza Bergues Morales. Universidad de Oriente, Cuba. E-mail: [laritza.bergues@estudiantes.uo.edu.cu](mailto:laritza.bergues@estudiantes.uo.edu.cu)

2-Argenis Adrián Soutelo Jiménez. Universidad de Oriente, Cuba. E-mail: [argenis@uo.edu.cu](mailto:argenis@uo.edu.cu)

3-Julio Alberto Rojas Vargas. Universidad de Oriente, Cuba. E-mail: [jarojas@uo.edu.cu](mailto:jarojas@uo.edu.cu)

4-Julio César Escalona Arranz. Universidad de Oriente, Cuba. E-mail: [jcea@uo.edu.cu](mailto:jcea@uo.edu.cu)

**Resumen:** En el presente trabajo se obtuvieron dos modelos discriminantes para la actividad antibacteriana. El modelo 1 se obtuvo empleando descriptores TOPS-MODE y de fragmentos, el modelo 2 con descriptores 3D y de fragmentos usando el Análisis Discriminante Lineal. El estudio se realizó con 292 compuestos cuyas actividades estaban reportadas en la literatura. El modelo 1 clasificó el 97,24 y 91,89% de casos activos y el 97,24 y 97,29% de casos inactivos con una clasificación global de 97,24 y 94,59% en las series de entrenamiento y predicción, respectivamente. El modelo 2 clasificó el 98,16 y 100% de casos activos y el 95,41 y 97,29% de casos inactivos con una clasificación global de 96,78 y 98,64% en las series de entrenamiento y predicción, respectivamente. Estos resultados y los valores de los índices estadísticos de los modelos permitieron demostrar sus calidades. Además, fueron calculadas las contribuciones de los fragmentos a la actividad antibacteriana para ambos modelos. El presente enfoque podría permitir un diseño racional de nuevos fármacos antibacterianos.

***Abstract:*** *In the present work, two discriminant models for the antibacterial activity were obtained. Model 1 was obtained employed fragments and TOPS-MODE descriptors, and model 2 fragments and 3D descriptors using the Linear Discriminant Analysis. The study was realized with 292 compounds whose activities were reported in literature. Model 1 classified 97,24 and 91,89% of active cases and 97,24 and 97,29% inactive cases with an accuracy of 97,24 and 94,59% in the training and prediction series respectively. Model 2 classified 98,16and 100% of active cases and 95,41 and 97,29% inactive cases with an accuracy of 96,78 and 98,64% in the training and prediction series respectively. These results and the values of statistical indices of the models, permitted to demonstrate its quality. Also, contributions of different fragments to the antibacterial activity were calculated for both models. The present focus may permit a rational design of potentially active and versatile antibacterial compounds.*

**Palabras Clave: QSAR; Antibacteriano; TOPS-MODE; Descriptores 3D; ADL.**

***Keywords: QSAR; Antibacterial; TOPS-MODE; 3D descriptors; LDA.***