

EL ESPACIO CONFORMACIONAL DE C-CINAMOILGLICÓSIDOS INHIBIDORES DE ANHIDRASAS CARBÓNICAS PRESENTES EN MICOBACTERIAS UN ESTUDIO TEÓRICO EXPERIMENTAL

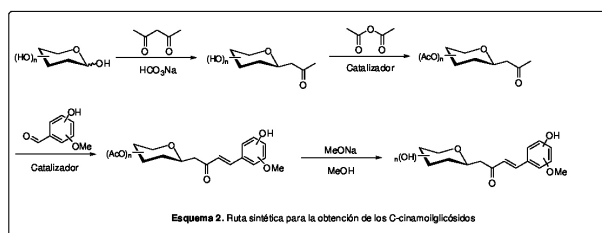
Riafrecha Leonardo

Pis Diez Reinaldo (Dir.), Colinas Pedro Alfonso (Codir.)

Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CIC-CONICET.

leriafrecha@hotmail.com**PALABRAS CLAVE:** C-cinamoilglicosidos, Anhidrasa carbónica, DFT.

En el presente trabajo se pretende sintetizar una serie de C-cinamoilglicósidos, que incorporen tanto la función fenólica como la metoxilo, que actúen como potenciales inhibidores selectivos de las anhidrasas carbónicas presentes en micobacterias. Por otro lado, se van a estudiar las conformaciones adoptadas por los C-cinamoilglicósidos empleando resonancia magnética nuclear y simulaciones computacionales. Siendo estos resultados los que permitan comparar esas conformaciones con datos existentes para glicosil ferulatos sintetizados por otros.

**ESTIMACIÓN BAYESIANA EN EL MODELO DE RIESGOS ADITIVOS**

Riddick Maximiliano Luis

Álvarez Enrique E. (Dir.)

Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP.

maximilianoriddick@gmail.com**PALABRAS CLAVE:** Estadística Bayesiana, Análisis de Supervivencia, Función de Riesgo.

En el "análisis de supervivencia", se estudia el comportamiento de variables que miden el tiempo hasta la ocurrencia de cierto evento de interés, por ejemplo, en medicina puede interesar el tiempo hasta la remisión de determinada enfermedad. Dada la naturaleza del estudio, es usual la presencia de "datos censurados", es decir, en estos casos, se mide la variable durante cierto período de tiempo, durante el cual no se ha observado el evento de interés.

En este contexto, se define la "función de riesgo", que se puede expresar en función de las expresiones de las funciones de densidad de probabilidad y de distribución acumulada de la variable en cuestión. Se suelen caracterizar los distintos modelos acorde a la expresión que toma su función de riesgo, siendo el más conocido el modelo de riesgos proporcionales de Cox [1]. Como alternativas, suelen aparecer otros modelos. Uno de ellos es en el cual basamos nuestro estudio: el modelo de riesgos aditivos (o AHM) [1]. Estos modelos (Cox, Aalen) son semi-paramétricos, ya que constan de una componente paramétrica y una no paramétrica. En el caso de AHM, Lin & Ying [3] abordaron el problema de la estimación de la componente paramétrica del modelo.

En nuestro trabajo, tratamos a este modelo mediante un enfoque Bayesiano para ambas componentes, basándonos en las ecuaciones

descriptas por Lin & Ying para la componente paramétrica. En el caso de la componente no paramétrica, proponemos, extendiendo lo expuesto el año anterior (Riddick, Álvarez [4]), un proceso a priori conjunto, optando por un proceso Gamma. Para ilustrar la eficacia del método, exponemos los resultados obtenidos mediante simulaciones, y en un conjunto de datos asociados a la medicina.

REFERENCIAS

- [1] Cox, D. R. (1972). "Regression Models and Life-Tables (with discussion)". *Journal of the Royal Statistical Society. Series B.* 34:2, 1972, 187-220.
- [2] Aalen, O. O.. A model for non-parametric regression analysis of counting processes. Lecture notes on Mathematics Statistics and Probability". 2, 1980, 1-25.
- [3] Lin, D. Y. & Ying, Z. "Semiparametric analysis of the additive risk model." *Biometrika*, 81, (1), 1994, 61-71.
- [4] Riddick, M.L.; Álvarez, E.E. "Estimación Bayesiana en el modelo de riesgos aditivos", *Reunión Anual de la Unión Matemática Argentina*, CABA; 2017.