## REGISTRO DE PRUEBA: COMPUESTOS PARA TRATAR LA TUBERCULOSIS.

Se consideró al siguiente conjunto de medicamentos:

- Rifapentine
- Rifabutin
- Rifampicin
- Pyrazinamide
- Isoniazid
- Ethambutol

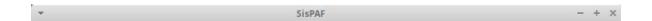
Para determinar, en orden descendente, cual es el que tiene más probabilidades de adherirse a una proteína vital (e inhibir su funcionamiento) de la bacteria Mycobacterium tuberculosis, responsable de la enfermedad de la tuberculosis.

La enzima a la que se desea adherir a los compuestos es:

- RNA-polymerase

Que es básicamente la encargada de mantener viva a la bacteria.

Utilizando SisPAF, se obtienen los resultados mostrados por la figura 1.



## Sistema para la Predicción de Actividad Farmacológica

| Compuesto    | Efectividad |
|--------------|-------------|
| Rifapentine  | -8.7        |
| Rifabutin    | -8.1        |
| Rifampicin   | -8.0        |
| Pyrazinamide | -3.8        |
| Isoniazid    | -3.8        |
| Ethambutol   | -3.7        |
|              |             |
|              |             |
|              |             |
|              |             |



FIGURA 1. Resultados del análisis del sistema.

CONCLUSIÓN: El sistema realiza una predicción aceptable, al definir a los medicamentos Rifapentine, Rifabutin y Rifampicin en los 3 primeros puestos, son solo decimas de diferencia. En la actualidad estos medicamentos, en conjunto con el Isoniazid se utilizan para tratar de manera parcial la enfermedad de la tuberculosis. El error promedio es de 2.5 unidades.

## TEST RECORD: COMPOUNDS TO TREAT TUBERCULOSIS.

The following set of medications were considered:

- Rifapentine
- Rifabutin
- Rifampicin
- Pyrazinamide
- Isoniazid
- Ethambutol

To determine, in descending order, which is the most likely to bind to a vital protein (and inhibit its functioning) from the bacterium Mycobacterium tuberculosis, responsible for tuberculosis disease.

The enzyme to which you want to adhere to the compounds is:

- RNA-polymerase

Which is basically responsible for keeping the bacteria alive.

Using SisPAF, the results shown in figure 1 are obtained.

Y SISPAF - + X

## Sistema para la Predicción de Actividad Farmacológica

| Efectividad |
|-------------|
| -8.7        |
| -8.1        |
| -8.0        |
| -3.8        |
| -3.8        |
| -3.7        |
|             |
|             |
|             |



FIGURE 1. Results of the system analysis.

CONCLUSION: The system makes an acceptable prediction, by defining the drugs Rifapentine, Rifabutin and Rifampicin in the first 3 positions, they are only tenths of difference. Currently these drugs, together with Isoniazid are used to partially treat tuberculosis disease. The average error is 2.5 units.