

**PRESENTACIONES ORALES**  
**MIÉRCOLES 17 (MAÑANA)**

- TM- PO1**      **A NOVEL APPROACH TO PREDICT AQUATIC TOXICITY FROM MOLECULAR STRUCTURE**  
**10:15-10:30**      J. A.Castillo Garit, Y.Marrero Ponce, J. Escobar, F. Torrens, R. Rotondo  
**am**
- TM-PO2**      **ESTIMATION OF ADME PROPERTIES IN DRUG DISCOVERY: PREDICTING CaCo-2 CELL**  
**10:30-10:45**      **PERMEABILITY USING ATOM-BASED STOCHASTIC AND NON-STOCHASTIC LINEAR**  
**am**                      **INDICES**  
J. A. Castillo Garit, Y. Marrero Ponce, F. Torrens, R. García Doménech
- TM-PO3**      **DERIVADA DEL GRAFO MOLECULAR COMO UNA NOVEDOSA VÍA PARA LA**  
**10:45-11:00**      **GENERACIÓN DE DESCRIPTORES MOLECULARES 2D/3D: TEORÍA Y APLICACIÓN QSPR**  
**am**                      O. Martínez Santiago
- TM-PO4**      **NUEVOS DESCRIPTORES MACROMOLECULARES BASADOS EN NUCLEÓTIDOS.**  
**11:00-11:15**      **APLICACIÓN EN PREDICCIÓN DE LA MAGNITUD DE INTERACCIÓN ENTRE EL  $\Psi$ -RNA**  
**am**                      **DEL VIH Y LA PAROMOMICINA**  
Y. Marrero Ponce, S. E. Ortega Broche
- TM-PO5**      **RELACIONES ESTRUCTURA QUÍMICA–ACTIVIDAD / PROPIEDAD / TOXICIDAD /**  
**11:30-11:45**      **FARMACOCINÉTICA: APLICACIONES Y POTENCIALIDADES DE LOS ESTUDIOS IN**  
**am**                      **SÍLICO**  
E. Molina Pérez, D. Nodarse Macías, N. Castañedo Cancio, M. A. Cabrera
- TM-PO6**      **MODELADO DE SISTEMAS DE CRECIMIENTO MULTICELULARES COMPLEJOS**  
**11:45-12:00**      F. Torrens, G. Castellano  
**am**

**MIÉRCOLES 17 (TARDE)**

- TM-PO7**      **BIOSYS: SOFTWARE PARA EL ESTUDIO DE SISTEMAS DINÁMICOS**  
**2:45-3:00**      N. Moreno Lemus, Y. González Mulet, E. Moreno Lemus, K. León Monzón  
**pm**
- TM-PO8**      **A NOVEL AND ENLARGED BALANCED DATABASE FOR QSAR MODELING OF THE**  
**3:00-3:15**      **PREDICTION OF TYROSINASE INHIBITORY ACTIVITY USING ATOM-BASED BILINEAR**  
**Pm**                      **INDICES**  
H. Le, G. M. Casañola Martín, Y. Marrero Ponce, M. Tareq, H. Khan
- TM-PO9**      **NUEVA HERRAMIENTA INFORMÁTICA PARA ESTUDIOS DE MODELACIÓN Y DISEÑO DE**  
**3:15- 3:30**      **FÁRMACOS**  
**pm**                      R. Carrasco Velar, A. Antelo Collado, Y. R. Pérez Valdés, J. A. Villaverde Martínez, Y. Mejías  
César, Y. Molina Souto, A. R. Rodríguez León, Y. Hernández Díaz, J. O. Prieto Entenza, I. Martí  
Pérez, A. Machín González, L. G. García Nápoles, Y. Rodríguez Garrido, Y. Martínez Vergara,  
M. Muñoz Roja, Y. Yero Tarancón, Y. Acosta Morales, V. M. Hernández Gutiérrez, Y. González  
Dorta, H. L. Herrera Martínez, T. de la Rosa Martín, O. Arencibia Benítez, J. G. Rodríguez  
Hernández, J. M. Ruiz Godoy, Y. Ramírez Hernández
- TM-PO10**      **PROGRAMA PARA EL CÁLCULO DISTRIBUIDO EN UNA RED LOCAL, DE DESCRIPTORES**  
**3:30-3:45**      **ATÓMICOS Y MOLECULARES**  
**Pm**                      A. René Rodríguez León, O. Arencibia Benítez. J. G. Rodríguez Hernández, D. Rodríguez Vega,  
A. Antelo Collado, R. Carrasco Velar
- TM-PO11**      **NUEVO ENFOQUE QUIMIO- INFORMÁTICO PARA LA DESCRIPCIÓN MOLECULAR DE LA**  
**3:45-4:00**      **ACTIVIDAD HIPNÓTICA SEDANTE DE COMPUESTOS ORGÁNICOS**  
**pm**                      C. Aguiar Puñal, Y. Marrero Ponce

- TM-PO12**      **TOMOCOMD-CAMPS E ÍNDICES BILINEALES MACROMOLECULARES PROTEICOS: PREDICCIÓN DE LA ESTABILIDAD EN UNA SERIE DE DÍMEROS ARC MUTADOS POR ALANINA**  
4:00-4:15 pm  
S. E. Ortega Broche, Y. Marrero Ponce
- TM-PO13**      **BOND-BASED LINEAR INDICES OF THE NON-STOCHASTIC AND STOCHASTIC EDGE ADJACENCY MATRIX. 1. THEORY AND MODELING OF PHYSICEM PROPERTIES OF ORGANIC MOLECULES**  
4:15-4:30 pm  
E. R. Martínez Albelo, Y. Marrero-Ponce, G. M. Casañola-Martín, J. A. Castillo Garit, V. Romero Zaldivar, F. Torrens, F. Pérez Jimenez
- TM-PO14**      **IDENTIFICACIÓN COMPUTACIONAL E "IN VITRO" DE NUEVOS COMPUESTOS LÍDERES CON ACTIVIDAD ANALGÉSICA**  
4:30-4:45 pm  
A. López Sacerio, G. Casañola Martín, Y. Marrero Ponce, J. Tytgat

CARTELES  
JUEVES 18 (MAÑANA)

- TM- 1**      **SOFTWARE PARA LA BÚSQUEDA DE FRAGMENTOS DE MOLÉCULAS EN BASES DE DATOS DE ESTRUCTURAS QUÍMICAS**  
Y. Molina Souto, Y. Martínez Vergara, M. Muñoz Roja, A. Antelo Collado, R. Carrasco Velar
- TM-2**      **LA SELECCIÓN DE VARIABLES PARA ESTUDIOS QSAR**  
Y. Hernández Díaz, H. L. Herrera Martínez, T. de la Rosa Martí, A. Antelo Collado, R. Carrasco Velar
- TM-3**      **A STRUCTURE-ACTIVITY STUDY OF CEPHALOSPORINS EMPLOYING SUPPORT VECTOR MACHINES**  
A. Machín González, A. Antelo Collado, Y. Hernández Díaz, R. Carrasco Velar
- TM-4**      **DESCRIPTORES DE AUTOCORRELACIONES 2D DEL DRAGÓN, SU EMPLEO EN LA PREDICCIÓN DE LA ACTIVIDAD INHIBITORIA SOBRE LA TELOMERASA POR ESTABILIZACIÓN DEL CUARTETO-G**  
D. Castillo González, M. A. Cabrera Pérez, A. Durán Martínez
- TM-5**      **PREDICTION OF TOXICITY AND MODES OF TOXIC ACTION OF PHENOLS USING ATOM-BASED NON-STOCHASTIC AND STOCHASTIC QUADRATIC INDICES**  
J. A. Castillo Garit, Y. Marrero Ponce, M. L. Yanes, G. Casañola Martín
- TM-6**      **MOLECULAR MODELING SELECTION AND EXPERIMENTAL ASSAYS FROM DICOUMARINS. A PROMISSORY IDENTIFICATION AS NOVEL TYROSINASE INHIBITOR COMPOUNDS**  
G. M. Casañola Martín, Y. Marrero Ponce, M. Tareq Hassan Khan, F. Torrens, A. Rescigno
- TM-7**      **ATOM-BASED STOCHASTIC AND NON-STOCHASTIC BILINEAR INDICES AND THEIR APPLICATIONS IN THE FIELD OF CHEMINFORMATICS-GUIDED BIOORGANIC MEDICINAL CHEMISTRY: DRY SELECTION AND WET EVALUATION FOR THE RATIONAL DISCOVERY OF NEW ANTHELMINTIC COMPOUNDS**  
Y. González Castañeda, Y. Marrero Ponce, V. J. Arán, Y. Ramírez Mederos, F. Pérez Jiménez, F. Ibarra Velarde, Y. Vera Montenegro, N. Rivera
- TM-8**      **COMPUTATIONAL CHEMISTRY APPROACH FOR THE EARLY DETECTION OF DRUG-INDUCED IDIOSYNCRATIC LIVER TOXICITY**  
M. Cruz Monteagudo, M. Natalia, D. S. Cordeiro, F. Borges, H. Pham
- TM-9**      **PREDICCIÓN DE INCOMPATIBILIDADES FÁRMACO-EXCIPIENTE UTILIZANDO MÉTODOS COMPUTACIONALES**  
Y. Cañizares Carmenate, M. Cruz Monteagudo, V. Ruz San Juan, M. González Bedia
- TM-10**      **PROCEDIMIENTO *IN SILICO* PARA LA OBTENCIÓN DE MODELOS QSAR EN ESTEROIDES ANABÓLICOS Y ANDROGÉNICOS**  
Y. M. Álvarez Ginarte