

APLICACIÓN DEL ALGORITMO DE ANÁLISIS DE CLUSTER A UNA SERIE DE 2-ARIL-1,3-INDADIONAS

Maria da Paz do N. Moreno, Sócrates C. H. Cavalcanti, Nelson O. Moreno Salazar, Hélio M. de O. Magalhães e Antonio J. Alves

Departamento de Farmácia, Universidade Federal de Pernambuco

50740-520 Recife, Pernambuco, Brasil

El análisis Jerárquico o *Cluster Analyse* es un método de análisis estadístico que tiene como objetivo agrupar los individuos más homogéneos de una serie. En este trabajo se presenta la aplicación de un método modificado, que realiza estudios de la relación estructura-actividad. El modelo aplicado tiene como objetivo prever los tipos de sustituyentes que se puede introducir en la molécula orgánica para propiciar una mayor actividad biológica. Inicialmente los sustituyentes que se van a introducir en el prototipo de molécula son seleccionados a través del método de clasificación Jerárquico modificado *Cluster Analyse* modificado. Se construye un árbol de agrupamiento para cada sitio de sustitución de la molécula. Los compuestos diferentes se pueden seleccionar escogiendo los caminos en estos árboles, con base en el análisis de la actividad de sus ramas, se usan las ecuaciones adecuadas del análisis de la Relación Cuantitativa Estructura-Actividad (QSAR). Esta técnica se aplica cuando hay un grande número de posibles sustituyentes por sitios e para esto se desarrolló un algoritmo. El algoritmo ejecuta los pasos siguientes: 1-Obtención de los parámetros normalizados. 2-Obtención de la matriz de distancias y de la distancia admisible. 3-Obtención de los vecinos. 4-Agrupamientos ordenados. 5-Reducción total del árbol, agrupando los sustituyentes más próximos, formando pseudo-sustituyentes. 6-Análisis de la actividad de las ramas con base en las ecuaciones de QSAR. Se aplicó el método a una serie de 2-aril-1,3-indadionas, siendo obtenidos como más activos los mismos compuestos verificados experimentalmente por otro autor .

Apoio financeiro: CNPq, CAPES e FACEPE

**OTIMIZAÇÃO
OBTENÇÃO DE**
Cynthia I.
Moreira Ba-
xas (Orien-
tadora Pr

Conhecendo
intermediária.
pontuais s
alto custo
mização da
na que tem
100g. A m-
intermediária,
diurético
rota de sí-
tro benzene-
cado que s
reações de
Meyer e po-
ram otimiza-
pa foram a-
nados na l-
rizado por
logia apli-
repassada }
pesp, CNPq