

# Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Resumen	xvii
Abstract	xix
Agradecimientos	1
<b>1. PRINCIPIOS BIOQUÍMICOS</b>	<b>3</b>
1.1. INTRODUCCIÓN	3
1.2. MEMBRANAS BIOLÓGICAS	3
1.2.1. Generalidades	3
1.2.2. Composición, arquitectura y dinámica de las membranas	4
1.3. BIOSEÑALIZACIÓN	8
1.3.1. Mecanismos moleculares de transducción de señal	9
1.3.2. La apoptosis es la muerte celular programada	9
1.4. SUPERFAMILIAS TNF Y TNFR	10
1.4.1. Generalidades	10
1.4.2. Estudios y características en miembros específicos	12
1.4.3. Dominios Transmembrana de los TNFR: antecedentes y abordaje actual	14
1.4.4. El modelado <i>Coarse Grained</i> :	15
<b>2. MÉTODOS</b>	<b>17</b>
2.1. INTRODUCCIÓN	17
2.2. CAMPOS DE FUERZA	17
2.3. CAMPO DE FUERZA MARTINI	19
2.3.1. Partículas CG	19

2.3.2. Interacciones . . . . .	20
2.3.3. Topologías Disponibles . . . . .	22
2.4. SIMULACIÓN DE DOMINIOS TRANSMEMBRANA DE MIEMBROS DE LA FAMILIA TNFR . . . . .	24
2.5. ANÁLISIS DE LAS SIMULACIONES . . . . .	26
2.5.1. Análisis geométrico de la interacción entre hélices . . . . .	26
2.5.2. Caracterización de resultados mediante Grafos . . . . .	29
2.5.3. Otras herramientas de análisis . . . . .	31
<b>3. ANÁLISIS DE LAS SIMULACIONES Y RESULTADOS</b>	<b>33</b>
3.1. INTRODUCCIÓN . . . . .	33
3.2. ANÁLISIS VISUAL DE LAS SIMULACIONES CG . . . . .	33
3.3. MAPAS DE DENSIDAD RADIAL . . . . .	35
3.4. HISTOGRAMAS DE DISTRIBUCIÓN ANGULAR . . . . .	39
3.5. MAPAS DE DENSIDAD DE ÁNGULOS $\alpha$ , $\beta$ Y DISTANCIAS . . . . .	43
3.6. CLASIFICACIÓN DE LAS INTERACCIONES . . . . .	44
3.6.1. Clusterizado basado en ángulos $\alpha$ y $\beta$ . . . . .	44
3.6.2. Clusterización Radial . . . . .	49
3.7. ESTUDIO DE INTERACCIONES MEDIANTE PROPIEDADES DE GRAFOS . . . . .	52
<b>4. OTROS MÉTODOS DE CLUSTERIZADO</b>	<b>59</b>
4.1. INTRODUCCIÓN . . . . .	59
4.2. MÉTODOS DE CLUSTERIZADO . . . . .	59
4.3. AGRUPAMIENTO CON EL ALGORITMO DBSCAN . . . . .	60
4.3.1. Generalidades . . . . .	60
4.3.2. Implementación del Algoritmo . . . . .	60
4.4. AGRUPAMIENTO CON EL ALGORITMO OPTICS . . . . .	69
4.4.1. Generalidades . . . . .	69
4.4.2. Implementación del algoritmo . . . . .	70
<b>5. CONCLUSIONES</b>	<b>75</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>79</b>