

FT: ΜΙΑ ΔΙΑΣΥΝΔΕΣΗ ΣΤΟΝ ΠΑΓΚΟΣΜΙΟ ΙΣΤΟ ΓΙΑ ΤΗ ΜΕΛΕΤΗ ΠΕΡΙΟΔΙΚΟΤΗΤΩΝ ΣΕ ΑΚΟΛΟΥΘΙΕΣ ΠΡΩΤΕΪΝΩΝ Ή DNA

**Pasquier, C.M., B.I. Προμπονάς, N.I. Βαρβαγιάννης
και Σ.Ι. Χαμόδρακας**

**Τμήμα Βιολογίας, Τομέας Βιολογίας Κυττάρου και Βιοφυσικής,
Πανεπιστήμιο Αθηνών, Αθήνα 157 01**

Το FT είναι μια νέα εφαρμογή της ανάλυσης Fourier για τον εντοπισμό περιοδικοτήτων σε ακολουθίες πρωτεϊνών ή DNA. Εκμεταλλεύεται τη δυνατότητα που δίνεται από τον Παγκόσμιο Ιστό για την παροχή εργαλείων στο ευρύ κοινό, χωρίς ανάγκη εγκατάστασης λογισμικού ή εξειδικευμένης δεξιοτήτας από τον χρήστη. Μπορεί να εκτελεστεί με οποιοδήποτε Java-συμβατό Φυλλομετρητή Ιστού στη διεύθυνση: <http://o2.db.uoa.gr/FT>. Περιοδικά μοτίβα και συνεχείς επαναλήψεις καταλοίπων συναντώνται συχνά σε ακολουθίες DNA ή πρωτεϊνών. Η αναγνώρισή τους βοηθά στην κατανόηση της μοριακής δομής και προτείνει τρόπους διαμοριακής συγκρότησης για το σχηματισμό δομών ανώτερης τάξης. Η ιδέα είναι να μετασχηματιστεί μια βιολογική ακολουθία σε αριθμητική, ώστε να εφαρμοσθεί σ' αυτή μαθηματική ανάλυση. Τα ψηφιακά δεδομένα μπορεί να αντιπροσωπεύουν φυσικές ιδιότητες των καταλοίπων (πχ. υδροφοβικότητα, μερικό φορτίο, βάρος) ή λογικούς δείκτες (1 ή 0) που ορίζουν αν κάποιο κατάλοιπο έχει χρησιμοποιηθεί στον υπολογισμό ή όχι. Έτσι γίνεται δυνατή η ανίχνευση περιοδικοτήτων για ομάδες καταλοίπων (πχ. πολικά, αλειφατικά κλπ.) και κατόπιν ο εντοπισμός επαναλήψεων στοιχείων δευτεροταγούς δομής, (πχ. επιλέγοντας κατάλοιπα που ευνοούν σχηματισμό α-ελίκων, β-πτυχωτών φύλλων). Ένας χρήστης μπορεί να εισάγει μια ακολουθία σε FASTA, SwissProt, ή PDB format, επιλέγοντας όλη την ακολουθία ή ένα τμήμα της για ανάλυση. Μετά την επιλογή των καταλοίπων για την ανίχνευση περιοδικοτήτων, μπορεί να εκτελεστεί το πρόγραμμα στον server μας και το αποτέλεσμα αναπαριστάνεται στον φυλλομετρητή του λίγα δευτερόλεπτα αργότερα. Το κύριο πρόγραμμα του FT είναι γραμμένο σε C++. Το πρόγραμμα για την εισαγωγή των δεδομένων είναι γραμμένο σε Java και επιτρέπει στους χρήστες να έχουν πιο φιλικό περιβάλλον από αυτό που παρέχεται από απλές HTML φόρμες, ελέγχει τα δεδομένα που εισάγονται από το χρήστη, τυπώνει μηνύματα σφαλμάτων και παρουσιάζει ενδιαφέρουσες πληροφορίες που αφορούν την εισαχθείσα ακολουθία.

A WEB INTERFACE FOR FT: A TOOL DEDICATED TO THE STUDY OF PERIODICITIES IN SEQUENCES

**Pasquier, C.M., V. J. Promponas, N.J. Varvayannis
and S.J. Hamodrakas**

**Department of Biology, Division of Cell Biology and Biophysics,
University of Athens, Athens 157 01, Greece**

FT is a new implementation of the Fourier analysis method to locate residue periodicities in aminoacid or DNA sequences. It takes advantage of the opportunity offered by the worldwide web to provide tools for a wide audience without any installation or expertise needed from the user. FT can be executed on any Java-compatible Web Browser at the address <http://o2.db.uoa.gr/FT>. Periodical patterns and tandem repeats of residues are often found in DNA and protein sequences. Their presence helps to understand the molecular structure of a protein and may suggest ways of ultramolecular assembly for the formation of higher order structure. The idea is to transform a biological sequence in a sequence of numbers in order to perform a mathematical analysis on it. The digital data may be represented by physical properties of the residues (e.g. hydrophobicity, partial charge, weight) or by logical indicators (1 or 0) which specify whether the residues have to be used in the calculation or not. This way, it is possible to search for periodicities of a group of residues (e.g. polar, aliphatic) and then detect repeats of secondary structure folds by selecting, for example, α -helix or β -sheet former residues. Users can type or copy a sequence in FASTA, SwissProt or PDB format and possibly select a part or the whole sequence for analysis. After selecting the residue or group of residues they wish to search for periodical appearance, they can run the program on our server and visualize the result on their web browser, usually in a few seconds. The core program of FT is written in C++. The data-input part, written in Java, allows users to benefit from an interface more user-friendly than those designed by HTML forms, controls the data entered, prints error messages and displays interesting information concerning the data entered.