Tabela: experimental methods

Opis: Relacja ta zawiera nazwe metody eksperymentalnej, przy pomocy której uzyskano informacje o danym kwasie nukleinowym. Do kazdej czasteczki w systemie przypisany jest dokładnie jeden wiersz tej tabeli.

Opis kolumn:

pole tabeli	opis pola	wartosci pola	typ pola	klucz
em_id	identyfikator tabeli	1..4	integer	główny
em_name	nazwa metody eksperymentalnej	*X-Ray Diffraction*, *NMR*, *Electron Microscopy* lub *Other*	varchar(50)	-

Tabela: *pdbs*

Opis: Zawiera ogólne informacje o czasteczce zdeponowanej w PDB. Kazdej czasteczce przypada dokładnie jedna krotka tej relacji.

Opis kolumn:

pole tabeli	opis pola	wartosci pola	typ pola	klucz
pdb_id	Identyfikator tabeli	kolejna wartosc sekwencji pdbs_pdb_id_seq	integer	główny
pdb_name	identyfikator pliku PDB	wartosc nadana w serwisie www.pdb.org	varchar(10)	unikalny
pdb_type	typ struktury	*RNA*, *DNA*, *HYB*	Character(3)	-
pdb_deposit_date	Data umieszczenia struktury w serwisie www.pdb.org		date	-
em_id	identyfikator metody eksperymentalnej	1..4	integer	zewnetrzny
pdb_functional_class	opis klasy funkcyjnej czasteczki	wartosc pobrana z pliku PDB	varchar(50)	-
pdb_resolution	Rozdzielczość metody eksperymentalnej X-Ray Difraction, wartość podana w Angstremach		integer	-
pdb_number_of_strands	liczba łancuchów w strukturze RNA		integer	-
pdb_whole_mix	sekwencja nukleotydów i struktura II-rzędowa w postaci kropkowo-nawiasowej, połączone ze sobą naprzemiennie w łancuchu znaków		text	-
pdb_whole_length	długosci poszczególnych łancuchów oddzielone od siebie znakiem '_'		varchar(50)	-

Tabela: sequences

Opis: Zawiera informacje o pojedynczym łancuchu kwasu rybonukleinowego.

Opis kolumn:

pole tabeli	opis pola	wartosci pola	typ pola	klucz
sequence_id	Identyfikator tabeli	kolejna wartosc sekwencji *sequence_sequence_id_seq*	integer	główny
pdb_id	identyfikator pliku PDB, z którego pochodzi dany łancuch		integer	zewnętrzny
sequence_strand_number	numer porzadkowy łancucha w pliku PDB integer		integer	-
sequence_chain_id	oznaczenie łancucha w pliku PDB		char(1)	-
klucz unikalny: atrybuty *pdb_id* i *sequence_strand_number*				

Tabela: *nucleotides*
Opis: Definiuje nukleotyd. Zawiera informacje o monomerze pobrane z pliku PDB oraz parametry obliczone przez RNAView i TorAng.
Opis kolumn:

pole tabeli	opis pola	wartosci pola	typ pola	klucz
nucleotide_id	identyfikator tabeli	kolejna wartość sekwencji *nucleotides_nucleotide_id_seq*	integer	główny
sequence_id	identyfikator łancucha struktury RNA, do którego nalezy dany nukleotyd		integer	zewnętrzny
nucleotide_residue_number	numer porzadkowy nukleotydu w łancuchu		integer	-
nucleotide_original_residue_number	numer porzadkowy nukleotydu w łancuchu zdefiniowany w pliku PDB		varchar (10)	-
nfl_id	identyfikator pełnej nazwy, która opisuje ten nukleotyd		integer	zewnętrzny
nucleotide_symbol_of_residue	symbol residuum	[ACGUacgu]	char(1)	zwykły b-drzewo
nucleotide_2d_structure	struktura II-rzędowa w postaci kropkowo-nawiasowej dla tego nukleotydu		char(1)	-
nucleotide_sugar_v0	parametr pofałdowania rybozy (v0); wartość podana mierze kątowej		float	-
nucleotide_sugar_v1	j.w. (v1)		float	-
nucleotide_sugar_v2	j.w. (v2)		float	-
nucleotide_sugar_v3	j.w. (v3)		float	-
nucleotide_sugar_v4	j.w. (v4)		float	-
nucleotide_sugar_p	parametr pseudorotacji (p); wartość podana w mierze kątowej		float	zwykły b-drzewo
nucleotide_sugar_tm	j.w. (tm)		float	zwykły b-drzewo
nucleotide_angle_alpha	wartość kata torsyjnego alfa, podana w mierze kątowej		float	-
nucleotide_angle_beta	j.w. — kąt beta		float	-
nucleotide_angle_delta	j.w. — kąt delta		float	-
nucleotide_angle_chi	j.w. — kąt chi		float	zwykły b-drzewo

nucleotide_angle_ gamma	j.w. — kąt gamma	float	zwykły b-drzewo
nucleotide_angle_ epsilon	j.w. — kąt epsilon	float	-
nucleotide_angle_ zeta	j.w. — kąt zeta	float	-
klucz unikalny: atrybuty *sequence_id* i *nucleotide_residue_number*			

Tabela: *nucleotide_full_names*
Opis: Opisuje nukleotyd przy pomocy nazw umieszczonych w pliku PDB.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
nfl_id	identyfikator tabeli	kolejna wartość sekwencji *nucleotides_nucleotide_ id_seq*	integer	główny
nfl_symbol_of_ residue	symbol residuum	[ACGUacgu]	char(1)	-
nfl_short_name	nazwa nukleotydu zdefiniowana w pliku PDB		varchar (10)	-
nfl_name	pełna nazwa nukleotydu zdefiniowana w pliku PDB		varchar (300)	-
klucz unikalny: atrybuty *nfl_symbol_of_residue, nfl_short_name* i *nfl_name*				

Tabela: *nucleotide_coordinates*
Opis: Opisuje współrzędne atomów nukleotydu, pobrane z pliku PDB.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
nucleotide_id	identyfikator tabeli oraz referencja do tabeli *pdbs*		integer	główny; zewnętrzny
nucleotide_ coordinates	wspólrzędne atomów nukleotydu pobrane z pliku PDB		text	-

Tabela: *duplexes*
Opis: Reprezentuje dupleksy występujące w strukturach.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
nucleotide_id	identyfikator tabeli oraz referencja do nukleotydu rozpoczynającego pierwszą nitkę (tabela *nucleotides*)		integer	główny; zewnętrzny
duplex_length	długość dupleksu		integer	zwykły b-drzewo
duplex_sequence	sekwencja obydwu nitek dupleksu, przedzielonych znakiem ‘_’		text	-

Tabela: *loops*
Opis: Reprezentuje loopy występujące w strukturach.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
loop_id	identyfikator tabeli	kolejna wartość sekwencji *loops_loop_id*	integer	główny

pdb_id	identyfikator pliku PDB, do którego należy dany loop	integer	zewnętrzny
loop_count	liczba nitek należących do loopa	integer	-
loop_nucleotide_ids	identyfikatory nukleotydów rozpoczynających poszczególne nitki w loopie (tablica)	integer []	-
loop_lengths	długości poszczególnych nitek tworzących danego loopa	integer []	-
loop_sequence	sekwencje nukleotydów tworzących poszczególne nitki loopa	varchar (100)[]	-
loop_ordered_ lengths	długości poszczególnych nitek tworzących danego loopa – posortowane (nie wykorzystywane aktualnie w systemie; pozostałość z poprzedniej koncepcji; w razie braku uwag co do funkcjonowania systemu, w wersji finalnej bedzie usunięte)	integer []	-
loop_ordered_ sequence	sekwencje nukleotydów tworzących poszczególne nitki loopa – posortowane (j.w.)	varchar (100)[]	-

Tabela: *multiplexes*
Opis: Reprezentuje multipleksy występujące w strukturach.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
multiplex_id	identyfikator tabeli	kolejna wartość sekwencji *multiplexes_multiplex_ id_seq*	integer	główny
multiplex_count	liczba nukleotydów należących do danego multipleksu		integer	-

Tabela: *multiplexes_have_nucleotides*
Opis: Przydziela multipleksom nukleotydy do nich należące.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
multiplex_id	identyfikator tabeli oraz referencja do multipleksu (tabela *multiplexes*)		integer	główny; zewnętrzny
nucleotide_id	referencja do nukleotydu (tabela *nucleotides*)		integer	zewnętrzny

Tabela: *bindings*
Opis: Zawiera informacje o wiazaniach miedzy nukleotydami.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
binding_id	identyfikator tabeli	kolejna wartość sekwencji *bindings_binding_id_seq*	integer	główny
nucleotide_id	referencja do pierwszego nukleotydu (tabela *nucleotides*) tworzącego wiązanie		integer	zewnętrzny
with_nucleotide_id	referencja do drugiego nukleotydu (tabela *nucleotides*) tworzącego wiązanie		integer	zewnętrzny; zwykły b-drzewo
previous_binding_id	referencja do poprzedniego wiązania (tabela *bindings*) tworzącego step		integer	zewnętrzny
bfn_id	referencja do tabeli *binding_full_names*		integer	zewnętrzny;

				zwykły b-drzewo
binding_common	wartość logiczna, świadcząca o tym czy wiązanie tworzy parę Watsona-Cricka lub parę Wobble'a		boolean	-
binding_symbol_if_residue	symbol residuum pierwszego monomeru tworzącego parę	[ACGUacgu]	char(1)	zwykły b-drzewo
binding_with_symbol_of_residue	symbol residuum drugiego monomeru tworzącego parę	[ACGUacgu]	char(1)	zwykły b-drzewo
binding_short_name	nazwa nukleotydu zdefiniowana w pliku PDB pierwszego monomeru tworzącego parę		varchar (10)	-
binding_with_short_name	nazwa nukleotydu zdefiniowana w pliku PDB drugiego monomeru tworzącego parę		varchar (10)	-
binding_parameter_shear	parametr opisujący wiązanie, pobrany z pliku X3DNA – shear		float	zwykły b-drzewo
binding_parameter_stretch	j.w – stretch		float	zwykły b-drzewo
binding_parameter_stagger	j.w – stagger		float	zwykły b-drzewo
binding_parameter_buckle	j.w – buckle		float	zwykły b-drzewo
binding_parameter_propeller	j.w – propeller		float	zwykły b-drzewo
binding_parameter_opening	j.w – opening		float	zwykły b-drzewo
binding_step_shift	parametr opisujący step, pobrany z pliku X3DNA – shift		float	zwykły b-drzewo
binding_step_slide	parametr opisujący step, pobrany z pliku X3DNA – slide		float	zwykły b-drzewo
binding_step_rise	parametr opisujący step, pobrany z pliku X3DNA – rise		float	zwykły b-drzewo
binding_step_tilt	parametr opisujący step, pobrany z pliku X3DNA – tilt		float	zwykły b-drzewo
binding_step_roll	parametr opisujący step, pobrany z pliku X3DNA – roll		float	zwykły b-drzewo
binding_step_twist	parametr opisujący step, pobrany z pliku X3DNA – twist		float	zwykły b-drzewo
klucz unikalny: atrybuty *nucleotide_id* i *with_nucleotide_id*				

Tabela: *binding_full_names*
Opis: Zawiera informacje o opisie wiązań w notacji Saengera i Westhofa.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
bfn_id	identyfikator tabeli	kolejna wartość sekwencji *bindings_binding_id_seq*	integer	główny
bfn_seanger_type	opis wiązania w notacji Saengera		varchar (20)	-
bfn_westhof_type	opis wiązania w notacji Westhofa		varchar (20)	-
klucz unikalny: atrybuty: *bfn_seanger_type* i *bfn_westhof_type*				

Tabela: *counts*
Opis: Zawiera statystyki liczbowe gromadzone podczas uzytkowania systemu. Dane w tej tabeli sa uaktualniane automatycznie przez system.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
count_name	identyfikator tabeli; nazwa obliczanej statystyki	*id pdb* (liczba kwasów rybonukleinowych w systemie), *residues* (liczba nukleotydów w systemie)	varchar (10)	główny
count_value	wartość statystyki		integer	-

Tabela: *parameters*
Opis: Zawiera statystyki utworzone na zbiorze testowym; definiuje przedziały równoilościowe dla nukleotydów i wiązań dla poszczególnych wartości parametrów.
Opis kolumn:

pole tabeli	**opis pola**	**wartosci pola**	**typ pola**	**klucz**
parameter_name	nazwa opisywanego parametru		varchar (40)	-
parameter_value	numer porządkowy przedziału opsiującego dany parametr		integer	-
parameter_lower_ bound	dolna wartość przedziału		float	-
parameter_upper_ bound	górna wartość przedziału		float	-
parameter_show_ name	nazwa przedziłu ukazująca się użytkownikowi podczas precyzowania parametru		varchar (200)	-
klucz główny: atrybuty: *parameter_name* i *parameter_value*				