Materialen

## Gebruikte moleculen

Ethanol.pdb: <https://bitbucket.org/mkempenaar/pypovray/src/master/pdb/ethanol.pdb>

Ethanol is ons start molecuul in het begin van de simulatie en van het metabolisch proces.

H20.pdb: <https://bitbucket.org/mkempenaar/pypovray/src/master/pdb/water.pdb>

CO2.pdb: <https://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/mim/environmental/html/co2_mol.htm>

H20(water) en CO2(koolstofdioxide) zijn de laatste 2 moleculen die aan het eind van het programma worden gevormd.

Acetyldehyde.pdb: <https://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/mim/environmental/html/acetaldehyde_mol.htm>

Acetaldehyde een nieuw gevormd molecuul nadat het ADH enzym deze heeft omgezet

ADH: <https://en.wikipedia.org/wiki/Alcohol_dehydrogenase#/media/File:Protein_ADH5_PDB_1m6h.png>

ALDH: <https://en.wikipedia.org/wiki/Aldehyde_dehydrogenase#/media/File:Monomer_with_an_NAD_(with_surface).png>

ADH en ALDH zijn enzymen die stoffen opnemen en een andere stoffen uitscheiden in ons proces

Azijnzuur.pdb: <https://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/mim/environmental/html/acetic_acid_mol.htm>

Azijnzuur wordt door ALDH afgebroken.

Acyl-CoA: <https://www.rcsb.org/structure/2Z1Q>

Acyl-CoA is een enzym voor het splitsen van azijnzuur in combinatie met NAD

Acetyl-CoA: <https://www.ch.ic.ac.uk/vchemlib/mim/bristol/acetylcoa/coa_mol.html>

Acetyl-CoA is een geladen enzym voor het omzetten naar water en koolstofdioxide

NAD: <https://nl.wikipedia.org/wiki/Nicotinamide-adenine-dinucleotide#/media/Bestand:NAD+-from-xtal-2003-3D-balls.png>

NAD is een co-enzym die nodig is voor het laatste proces in onze simulatie.

## Software

Python 3.8.5

Povray 3.7

Vapory 0.1.01

Math module

Pypovray

# Methoden

Onze flowchart is te vinden als bijgevoegd bestand ‘Flowchat.pdf’ deze flowchart is gemaakt in combinatie met de online gevonden flowchart op, <https://stoprijdenonderinvloednls.jouwweb.nl/afbraak-van-alcohol> hierdoor hebben wij het proces voor onszelf kunnen verduidelijken en onze flowchart kunnen verbeteren op basis van de gevonden informatie.

We hebben tijdens de voorbereidende lessen van Ronald Wedema onze voorbeeld code en opdrachten gehaald uit <https://bitbucket.org/mkempenaar/pypovray> dit is een Bitbucket repository, een online platform voor het delen van code en geschreven informatie op het internet.

<https://bitbucket.org/WesleyRorije/alcohol-afbraak/src/master/>

Deze repository werd gebruikt om onze code te kunnen delen en wanneer één van ons aanpassingen schreef aan het programma de andere programmeur deze updates direct kon gebruiken en of uitbreiden.