

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА СОЗДАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ГИДРОЛИЗА МОЛОЧНЫХ БЕЛКОВ

И.М. Чанов, chanovi2000@mail.ru

О.В. Зинина, zininaov@susu.ru

Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия

Аннотация. В молочной промышленности, как и в других отраслях, образуется большое количество вторичных сырьевых ресурсов, одним из наиболее весомых является молочная сыворотка. Данное сырье богато белками с высоким биологическим потенциалом, реализуемым при гидролизе белка и получении биоактивных пептидов. Выбор ферментов для проведения гидролиза с целью получения тех или иных биоактивных пептидов сопряжен с длительностью и затратностью, что можно оптимизировать применением методов *in silico*. Целью работы является разработка алгоритма создания базы данных для моделирования влияния ферментов на сывороточные белки, а также программного обеспечения для оптимизации целенаправленного гидролиза белков молочной сыворотки ферментами, воздействующими на β -лактоглобулин и α -лактальбумин, для получения специфичных биологически активных пептидов. Молочная сыворотка является источником белков β -лактоглобулина и α -лактальбумина. Информация для формирования базы данных была получена из известных источников (BIOPEP-UWM, PeptideCutter, UniProtKB и InterPro). База данных создавалась с использованием системы управления базами данных SQLite. Программа разрабатывалась на основе созданной базы данных и с применением графической библиотеки виджетов Tkinter с использованием языка программирования Python. Проверена работоспособность программы, она выдаёт точный набор ферментов для получения пептида или цепочки пептидов в зависимости от предварительно выбранного для гидролиза молочного белка.

Ключевые слова: молочная сыворотка, сывороточные белки, *in silico*, база данных, гидролиз белка

Для цитирования: Чанов И.М., Зинина О.В. Разработка алгоритма создания информационных ресурсов для прогнозирования гидролиза молочных белков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Пищевые и биотехнологии». 2025. Т. 13, № 2. С. 112–122. DOI: 10.14529/food250212

Original article
DOI: 10.14529/food250212

DEVELOPMENT OF AN ALGORITHM FOR CREATING INFORMATION RESOURCES FOR FORECASTING MILK PROTEIN HYDROLYSIS

I.M. Chanov, chanovi2000@mail.ru

O.V. Zinina, zininaov@susu.ru

South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

Abstract. The dairy industry, like other industries, produces a large number of secondary raw materials, one of the most significant of which is whey. This raw material is rich in proteins with high biological potential, realized during protein hydrolysis and obtaining bioactive peptides. The choice of enzymes for hydrolysis in order to obtain certain bioactive peptides is time-consuming and expensive, which can be optimized using *in silico* methods. The aim of the research is to de

velop an algorithm for creating a database for modeling the effect of enzymes on whey proteins, as well as software for optimizing targeted hydrolysis of whey proteins with enzymes acting on β -lactoglobulin and α -lactalbumin to obtain specific biologically active peptides. Whey is a source of β -lactoglobulin and α -lactalbumin proteins. Information for the formation of the database was obtained from well-known sources (BIOPEP-UWM, PeptideCutter, UniProtKB and InterPro). The database was created using the SQLite database management system. The program was developed based on the created database and using the Tkinter graphical widget library using the Python programming language. The program's functionality has been tested; it produces an exact set of enzymes for obtaining a peptide or a chain of peptides depending on the milk protein previously selected for hydrolysis.

Keywords: whey, whey proteins, *in silico*, database, protein hydrolysis

For citation: Chanov I.M., Zinina O.V. Development of an algorithm for creating information resources for forecasting milk protein hydrolysis. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Food and Biotechnology*, 2025, vol. 13, no. 2, pp. 112–122. (In Russ.) DOI: 10.14529/food250212

Введение

Пищевые отходы благодаря своему органическому составу и масштабному производству представляют собой значительный ресурс для вторичной переработки [1]. Эти отходы образуются на различных стадиях производственного цикла – начиная от производства, последующей обработки и заканчивая переработкой пищевых продуктов [2]. ООН ставит цель: уменьшить количество пищевых отходов вдвое к 2030 году. Решение этой проблемы также имеет важное экономическое значение [3]. Ежегодно в пищевой отрасли образуется несколько миллионов тонн вторичных ресурсов и отходов [4]. Согласно данным Федерального классификационного каталога отходов (ФККО), утверждённого приказом Росприроднадзора от 22.05.2017 № 242 (ред. от 20.12.2024), основными отходами молочной промышленности являются пахта, обезжиренное молоко и молочная сыворотка [5].

Молочная сыворотка представляет собой ценный источник сывороточных белков, обогащённых минералами, витаминами и другими полезными веществами [6]. Под действием ферментативного катализа она подвергается гидролизу, который обеспечивает получение белков с уникальными функциями благодаря наличию биоактивных пептидов [7]. Биоактивные пептиды – это белковые фрагменты, полезные для функционирования различных систем организма и общего состояния здоровья человека [8].

Ферментативный гидролиз белков молочной сыворотки представляет собой перспек-

тивный метод модификации функциональных свойств белкового сырья, направленный на получение ценных пептидных фракций, обладающих широким спектром биологической активности. Данный процесс позволяет целенаправленно расщеплять полипептидные цепи белков молочной сыворотки под действием протеолитических ферментов, высвобождая пептиды с определёнными аминокислотными последовательностями, которые могут проявлять антиоксидантные, антигипертензивные, иммуномодулирующие и другие полезные свойства [9–11].

Сегодня одним из эффективных методов прогнозирования активности ферментов является применение молекулярного моделирования [12], которое помогает существенно сократить время на выявление возможных биологических эффектов [13].

Метод *in silico* представляет собой мощный инструмент в исследовании ферментативного гидролиза белков молочной сыворотки, позволяющий оптимизировать протеолиз, прогнозировать образование биоактивных пептидов и сократить время и затраты на экспериментальные исследования. Применение вычислительных методов позволяет детально изучить взаимодействие протеаз с белками на молекулярном уровне, предсказывать места расщепления полипептидных цепей и идентифицировать пептиды с потенциальной биологической активностью.

Актуальным направлением является разработка информационных ресурсов, используемых для прогнозирования процесса гидролиза молочных белков с установлением выхода

необходимых биоактивных пептидов. Таким образом, **целью работы** является разработка алгоритма создания базы данных для моделирования влияния ферментов на сывороточные белки, а также программного обеспечения для оптимизации целенаправленного гидролиза белков молочной сыворотки ферментами, воздействующими на β -лактоглобулин и α -лактальбумин, для получения специфичных биологически активных пептидов.

Материалы и методы

Проведён поиск информации о сывороточных белках β -лактоглобулине и α -лактальбумине с использованием баз данных UniProtKB и InterPro.

UniProt – это база данных, включающая данные о последовательностях белков и их биологической роли, полученные из научных публикаций.

InterPro – инструмент, предоставляющий функциональный анализ белков путём группировки их по категориям и предсказания доменов и важных участков [14].

Для изучения влияния ферментов на биотехнологические характеристики белков методом *in silico* применялась база данных BIOPER-UWM.

BIOPER-UWM используется в исследованиях биологически активных пептидов, особенно полученных из пищевых субстратов [15].

Выбор ферментов производился с помощью базы данных PeptideCutter.

PeptideCutter предсказывает возможные точки расщепления, осуществляемые протеазами или химическими агентами в заданной белковой последовательности.

Последовательности белков β -лактогло-

булина и α -лактальбумина были получены из базы данных белков UniProtKB или InterPro. PeptideCutter генерирует перечень ферментов, способных расщеплять данную аминокислотную последовательность, указывает число точек расщепления и их местоположение, а также выделяет ферменты, неспособные осуществить расщепление. Среди расщепляющих ферментов предпочтение было отдано тем, которые обеспечивают наибольшее количество расщеплений: Proteinase K; Thermolysin; Pepsin (pH 1.3); Pepsin (pH > 2); Trypsin; Chymotrypsin A; Chymotrypsin C.

Все данные, собранные из базы данных BIOPER-UWM, требуются для формирования новой базы данных. Для её разработки был использован язык программирования Python.

Python – это интерпретируемый высокоуровневый универсальный язык программирования широкого профиля.

Для описания структуры баз данных, управления данными, организации доступа к ним и объектов базы данных, а также управления транзакциями применяется язык SQL (Structured Query Language). Для работы с данными выбрана система управления базами данных SQLite.

SQLite – это реляционная СУБД, где вся база данных хранится в одном файле [16]. Для подключения программы на языке Python к системе управления базами данных SQLite, используется модуль “sqlite3”, который является синонимом “sq”.

Результаты исследований и обсуждение

Результаты действия ферментов на β -лактоглобулин и α -лактальбумин представлены в табл. 1, 2.

Таблица 1

Результаты действия ферментов на α -лактальбумин

Фермент	Результат действия ферментов и расположение высвобождаемых пептидов
Proteinase K	Results of enzyme action EQL - TKCEAF - QKL - KDL - KDY - GGV - SL - P - EW - V - CTAF - HTSGY - DTQAI - V - QNNDSTEY - GL - F - QI - NNKI - W - CKDDQNP - HSRNI - CNI - SCDKF - L - DDDL - TDDI - V - CAKKI - L - DKV - GI - NY - W - L - AHKAL - CSEKL - DQW - L - CEKL Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_E, W, B_E, V Location of released peptides [1-3],[4-9],[10-12],[13-15],[16-18],[19-21],[22-23],[24-24],[25-26],[27-27],[28-31],[32-36],[37-41],[42-42],[43-50],[51-52],[53-53],[54-55],[56-59],[60-60],[61-67],[68-72],[73-75],[76-80],[81-81],[82-85],[86-89],[90-90],[91-95],[96-96],[97-99],[100-101],[102-103],[104-104],[105-105],[106-110],[111-115],[116-118],[119-119],[120-123]

Окончание табл. 1

Фермент	Результат действия ферментов и расположение высвобождаемых пептидов
Thermolysin	Results of enzyme action EQ - LTKCE - A - FQK - LKD - LKD - YGG - VS - LPEW - VCT - A - FHTSG - YDTQ - A - I - VQNNSTE - YG - L - FQ - INNK - IWCKDDQNPHSRN - ICN - ISCDK - F - LDDD - LTDD - I - VC - AKK - I - LDK - VG - IN - YW - L - AHK - A - LCSEK - LDQW - LCEK - L Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_t, W, B_E, V Location of released peptides [1-2], [3-7], [8-8], [9-11], [12-14], [15-17], [18-20], [21-22], [23-26], [27-29], [30-30], [31-35], [36-39], [40-40], [41-41], [42-49], [50-51], [52-52], [53-54], [55-58], [59-71], [72-74], [75-79], [80-80], [81-84], [85-88], [89-89], [90-91], [92-94], [95-95], [96-98], [99-100], [101-102], [103-104], [105-105], [106-108], [109-109], [110-114], [115-118], [119-122], [123-123]
Pepsin pH >2	Results of enzyme action E - Q - L - T - K - CE - A - F - Q - K - L - K - D - L - K - D - Y - G - G - VSL - PE - W - VCT - A - F - HT - SG - Y - D - T - Q - A - I - VQ - N - N - D - ST - E - Y - G - L - F - Q - IN - N - K - IWCK - D - D - Q - N - PHSRN - ICN - ISCD - K - F - L - D - D - L - T - D - D - I - VCA - K - K - IL - D - K - VG - IN - Y - WL - A - HK - A - L - CSE - K - L - D - Q - WL - CE - K - L Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_t, W, B_E, V Location of released peptides [1-1], [2-2], [3-3], [4-4], [5-5], [6-7], [8-8], [9-9], [10-10], [11-11], [12-12], [13-13], [14-14], [15-15], [16-16], [17-17], [18-18], [19-19], [20-20], [21-23], [24-25], [26-26], [27-29], [30-30], [31-31], [32-33], [34-35], [36-36], [37-37], [38-38], [39-39], [40-40], [41-41], [42-43], [44-44], [45-45], [46-46], [47-48], [49-49], [50-50], [51-51], [52-52], [53-53], [54-54], [55-56], [57-57], [58-58], [59-62], [63-63], [64-64], [65-65], [66-66], [67-71], [72-74], [75-78], [79-79], [80-80], [81-81], [82-82], [83-83], [84-84], [85-85], [86-86], [87-87], [88-88], [89-89], [90-92], [93-93], [94-94], [95-96], [97-97], [98-98], [99-100], [101-102], [103-103], [104-105], [106-106], [107-108], [109-109], [110-110], [111-113], [114-114], [115-115], [116-116], [117-117], [118-119], [120-121], [122-122], [123-123]
Trypsin	Results of enzyme action EQLTK - CEAFQK - LK - DLK - DYGGVSLPEWVCTAFHTSGYDTQAIQVQNNSTEYGLFQINNK - IWCK - DDQNPHSR - NICNISCDK - FLDDDLTDDIVCAK - K - ILDK - VGINYWLAHK - ALCSEK - LDQWLCEK - L Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_t, W, B_E, V Location of released peptides [1-5], [6-11], [12-13], [14-16], [17-58], [59-62], [63-70], [71-79], [80-93], [94-94], [95-98], [99-108], [109-114], [115-122], [123-123]
Chymotrypsin A	Results of enzyme action EQL - TKCEAF - QKL - KDL - KDY - GGVSL - PEW - VCTAF - H - TSGY - DTQAIQVN - N - DSTEY - GL - F - QIN - N - KIW - CKDDQN - PH - SRN - ICN - ISCDKF - L - DDDL - TDDIVCAKIL - DKVGIN - Y - W - L - AH - KAL - CSEKL - DQW - L - CEKL Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_t, W, B_E, V Location of released peptides [1-3], [4-9], [10-12], [13-15], [16-18], [19-23], [24-26], [27-31], [32-32], [33-36], [37-44], [45-45], [46-50], [51-52], [53-53], [54-56], [57-57], [58-60], [61-66], [67-68], [69-71], [72-74], [75-80], [81-81], [82-85], [86-96], [97-102], [103-103], [104-104], [105-105], [106-107], [108-110], [111-115], [116-118], [119-119], [120-123]
Chymotrypsin C	Results of enzyme action E - Q - L - TKCE - AFQ - KL - KDL - KDY - GGVSL - P - E - W - VCTAFHTSGY - DTQ - AIVQ - N - N - DSTE - Y - GL - FQ - IN - N - KIW - CKDDQ - N - P - HSRN - ICN - ISCDKFL - DDDL - TDDIVCAKIL - DKVGIN - Y - W - L - AHKAL - CSE - KL - DQ - W - L - CE - KL Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_t, W, B_E, V Location of released peptides [1-1], [2-2], [3-3], [4-7], [8-10], [11-12], [13-15], [16-18], [19-23], [24-24], [25-25], [26-26], [27-36], [37-39], [40-43], [44-44], [45-45], [46-49], [50-50], [51-52], [53-54], [55-56], [57-57], [58-60], [61-65], [66-66], [67-67], [68-71], [72-74], [75-81], [82-85], [86-96], [97-102], [103-103], [104-104], [105-105], [106-110], [111-113], [114-115], [116-117], [118-118], [119-119], [120-121], [122-123]

Таблица 2

Результаты действия ферментов на β -лактоглобулин

Фермент	Результат действия ферментов и расположение высвобождаемых пептидов
Proteinase K	Results of enzyme action I - I - V - TQTM - KGL - DI - QKV - AGTW - Y - SL - AM - AASDI - SL - L - DAQSAP - L - RV - Y - V - EEL - KP - TP - EGNL - EI - L - L - QKW - ENGECQAQKI - I - AEKTKI - P - AV - F - KI - DAL - NENKV - L - V - L - DTDY - KKY - L - L - F - CM - ENSAEP - EQSL - ACQCL - V - RTP - EV - DNEAL - EK - F - DKAL - KAL - P - M - HI - RL - AF - NP - TQL - EGQCHV Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_p, W, B_E, V Location of released peptides [1-1], [2-2], [3-3], [4-7], [8-10], [11-12], [13-15], [16-19], [20-20], [21-22], [23-24], [25-29], [30-31], [32-32], [33-38], [39-39], [40-41], [42-42], [43-43], [44-46], [47-48], [49-50], [51-54], [55-56], [57-57], [58-58], [59-61], [62-71], [72-72], [73-78], [79-79], [80-81], [82-82], [83-84], [85-87], [88-92], [93-93], [94-94], [95-95], [96-99], [100-102], [103-103], [104-104], [105-105], [106-107], [108-113], [114-117], [118-122], [123-123], [124-126], [127-128], [129-133], [134-136], [137-140], [141-143], [144-144], [145-145], [146-147], [148-149], [150-151], [152-153], [154-156], [157-162]
Thermolysin	Results of enzyme action I - I - VTQTMKG - LD - IQK - V - AGTW - YS - L - AM - A - ASD - IS - L - LD - AQS - AP - LR - V - Y - VEE - LKPTPEGN - LE - I - L - LQKWENGEC - AQKK - I - I - AEKTK - IP - A - V - FK - ID - A - LNEKN - V - L - V - LDTD - YKK - Y - L - L - FCMENS - AEPEQS - L - ACQC - L - VRTPE - VDNE - A - LEK - FDK - A - LK - A - LPMH - IR - L - A - FNPTQ - LEGQCH - V Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_p, W, B_E, V Location of released peptides [1-1], [2-2], [3-9], [10-11], [12-14], [15-15], [16-19], [20-21], [22-22], [23-24], [25-25], [26-28], [29-30], [31-31], [32-33], [34-36], [37-38], [39-40], [41-41], [42-42], [43-45], [46-53], [54-55], [56-56], [57-57], [58-66], [67-70], [71-71], [72-72], [73-77], [78-79], [80-80], [81-81], [82-83], [84-85], [86-86], [87-91], [92-92], [93-93], [94-94], [95-98], [99-101], [102-102], [103-103], [104-104], [105-110], [111-116], [117-117], [118-121], [122-122], [123-127], [128-131], [132-132], [133-135], [136-138], [139-139], [140-141], [142-142], [143-146], [147-148], [149-149], [150-150], [151-155], [156-161], [162-162]
Pepsin pH 1.3	Results of enzyme action IIVTQTMKGL - DIQKVAGTWYS - AMAASDISL - L - DAQSAPL - RVYVEEL - KPTPEGNL - EIL - L - QKWENGECQAQKIAEKTIPAVF - KIDAL - NENKVL - VL - DTDYKKYL - L - F - CMENSAEPEQSL - ACQCL - VRTPEVDNEAL - EK - F - DKAL - KAL - PMHRL - AF - NPTQL - EGQCHV Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_p, W, B_E, V Location of released peptides [1-10], [11-22], [23-31], [32-32], [33-39], [40-46], [47-54], [55-57], [58-58], [59-82], [83-87], [88-93], [94-95], [96-103], [104-104], [105-105], [106-117], [118-122], [123-133], [134-136], [137-140], [141-143], [144-149], [150-151], [152-156], [157-162]
Pepsin pH >2	Results of enzyme action I - I - VT - Q - T - M - K - G - L - D - IQ - K - VA - G - T - WY - SL - A - M - A - A - SD - ISL - L - D - A - Q - SA - PL - R - VY - VE - E - L - K - PT - PE - G - N - L - E - IL - L - Q - K - WE - N - G - E - CA - Q - K - K - I - IA - E - K - T - K - IPA - VF - K - ID - A - L - N - E - N - K - VL - VL - D - T - D - Y - K - K - Y - L - L - F - CM - E - N - SA - E - PE - Q - SL - A - CQ - CL - VRT - PE - VD - N - E - A - L - E - K - F - D - K - A - L - K - A - L - PM - H - IRL - A - F - N - PT - Q - L - E - G - Q - CH - V Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_p, W, B_E, V Location of released peptides [1-1], [2-2], [3-4], [5-5], [6-6], [7-7], [8-8], [9-9], [10-10], [11-11], [12-13], [14-14], [15-16], [17-17], [18-18], [19-20], [21-22], [23-23], [24-24], [25-25], [26-26], [27-28], [29-31], [32-32], [33-33], [34-34], [35-35], [36-37], [38-39], [40-40], [41-42], [43-44], [45-45], [46-46], [47-47], [48-49], [50-51], [52-52], [53-53], [54-54], [55-55], [56-57], [58-58], [59-59], [60-60], [61-62], [63-63], [64-64], [65-65], [66-67], [68-68], [69-69], [70-70], [71-71], [72-73], [74-74], [75-75], [76-76], [77-77], [78-80], [81-82], [83-83], [84-85], [86-86], [87-87], [88-88], [89-89], [90-90], [91-91], [92-93], [94-95], [96-96], [97-97], [98-98], [99-99], [100-100], [101-101], [102-102], [103-103], [104-104], [105-105], [106-107], [108-108], [109-109], [110-111], [112-112], [113-114], [115-115], [116-117], [118-118], [119-120], [121-122], [123-125], [126-127], [128-129], [130-130], [131-131], [132-132], [133-133], [134-134], [135-135], [136-136], [137-137], [138-138], [139-139], [140-140], [141-141], [142-142], [143-143], [144-145], [146-146], [147-149], [150-150], [151-151], [152-152], [153-154], [155-155], [156-156], [157-157], [158-158], [159-159], [160-161], [162-162]
Trypsin	Results of enzyme action IIVTQTMK - GLDIQK - VAGTWYSLAMAASDISLLDAQSAPLR - VYVEELK - PTEGNLEILLQK - WENGECQAK - K - IIAEK - TK - IPAQVK - IDALNENK - VLVDTDYK - K - YLLFCMENSAEPEQSLACQCLVR - TPEVDNEALEK - FDK - ALK - ALPMHIR - LAFNPTQLEGQCHV Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_p, W, B_E, V Location of released peptides [1-8], [9-14], [15-40], [41-47], [48-60], [61-69], [70-70], [71-75], [76-77], [78-83], [84-91], [92-100], [101-101], [102-124], [125-135], [136-138], [139-141], [142-148], [149-162]

Окончание табл. 2

Фермент	Результат действия ферментов и расположение высвобождаемых пептидов
Chymotrypsin A	Results of enzyme action IIVTQTM - KGL - DIQKVAGTW - Y - SL - AM - AASDISL - L - DAQSAPL - RVY - VEEL - KPTPEGN - L - EIL - L - QKW - EN - GECAQKKIAEKTIPAVF - KIDAL - N - EN - KVL - VL - DTDY - KKY - L - L - F - CM - EN - SAEPEQSL - ACQCL - VRTPEVDN - EAL - EKF - DKAL - KAL - PM - H - IRL - AF - N - PTQL - EGQCH - V Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_T, W, B_E, V Location of released peptides [1-7], [8-10], [11-19], [20-20], [21-22], [23-24], [25-31], [32-32], [33-39], [40-42], [43-46], [47-53], [54-54], [55-57], [58-58], [59-61], [62-63], [64-82], [83-87], [88-88], [89-90], [91-93], [94-95], [96-99], [100-102], [103-103], [104-104], [105-105], [106-107], [108-109], [110-117], [118-122], [123-130], [131-133], [134-136], [137-140], [141-143], [144-145], [146-146], [147-149], [150-151], [152-152], [153-156], [157-161], [162-162]
Chymotrypsin C	Results of enzyme action IIVTQ - TM - KGL - DIQ - KVAGTW - Y - SL - AM - AASDISL - L - DAQ - SAP - L - RVY - VE - E - L - KP - TP - E - GN - L - E - IL - L - Q - KW - E - N - GE - CAQ - KKIIE - KTKIP - AVFKIDAL - N - E - N - KVL - VL - DTDY - KKY - L - L - FCM - E - N - SAE - P - E - Q - SL - ACQ - CL - VRTP - E - VDN - E - AL - E - KFDKAL - KAL - P - M - HIRL - AFN - P - TQ - L - E - GQ - CHV Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_T, W, B_E, V Location of released peptides [1-5], [6-7], [8-10], [11-13], [14-19], [20-20], [21-22], [23-24], [25-31], [32-32], [33-35], [36-38], [39-39], [40-42], [43-44], [45-45], [46-46], [47-48], [49-50], [51-51], [52-53], [54-54], [55-55], [56-57], [58-58], [59-59], [60-61], [62-62], [63-63], [64-65], [66-68], [69-74], [75-79], [80-87], [88-88], [89-89], [90-90], [91-93], [94-95], [96-99], [100-102], [103-103], [104-104], [105-107], [108-108], [109-109], [110-112], [113-113], [114-114], [115-115], [116-117], [118-120], [121-122], [123-126], [127-127], [128-130], [131-131], [132-133], [134-134], [135-140], [141-143], [144-144], [145-145], [146-149], [150-152], [153-153], [154-155], [156-156], [157-157], [158-159], [160-162]

Начальная часть кода для работы с базой данных показана на рис. 1.

```
import sqlite3 as sq #Вывод модуля из библиотеки

db = sq.connect('Protein.db') #Установка с базой данных
cur = db.cursor() #Переменная для взаимодействия с базой данных
```

Рис. 1. Код привязки языка Python с системой баз данных SQLite

В методе “execute” выполняется запрос “CREATE TABLE alphasactalbumin”, что означает создание таблицы для необходимого белка α-лактальбумина, аналогичные действия выполняются при заполнении таблицы данных для β-лактоглобулина. Получившийся код создания таблиц в базе данных представлен на рис. 2.

```
cur.execute("""CREATE TABLE IF NOT EXISTS alphasactalbumin (
    фермент TEXT,
    Высвобожденные пептиды TEXT
) """)

cur.execute("""CREATE TABLE IF NOT EXISTS betalactoglobulin (
    фермент TEXT,
    Высвобожденные пептиды TEXT
) """)
```

Рис. 2. Код создания таблиц в базе данных

Для подтверждения создания запрашиваемой таблицы используется метод “commit”.

Код получившейся базы данных представлен на рис. 3.

Для внесения новых данных в полученную базу данных используется система управления баз данных SQLite. Для внесения данных о высвобождаемых пептидах необхо-

димо нажать на вкладку «Данные», в списке таблиц выбирается “alphalactalbumin”, далее – «Добавить запись», как показано на рис. 4, и вводятся все необходимые данные для данной таблицы. Аналогичные действия производятся с таблицей “betalactoglobulin”.

Итоговые таблицы с данными о пептидах представлены на рис. 5.

```
import sqlite3 as sq #Вывод модуля из библиотеки

db = sq.connect('Protein.db')#Установление с базой данных
cur = db.cursor()#Переменная для взаимодействия с базой данных

cur.execute("""CREATE TABLE IF NOT EXISTS alphalactalbumin (
    фермент TEXT,
    Высвобожденные пептиды TEXT
)""") #Создание таблицы для alpha-lactalbumin

cur.execute("""CREATE TABLE IF NOT EXISTS betalactoglobulin (
    фермент TEXT,
    Высвобожденные пептиды TEXT
)""")#Создание таблицы для beta-lactoglobulin

db.commit()#Подтверждение создания базы данных

db.close()#Закрытие базы данных
```

Рис. 3. Код создания базы данных

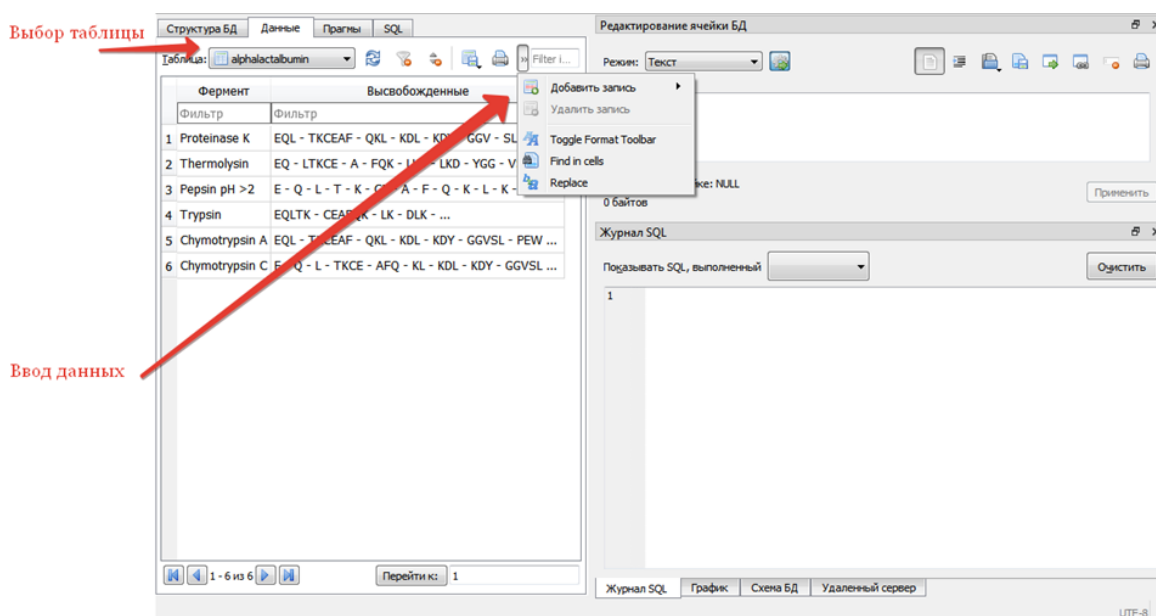


Рис. 4. Ввод данных в базу данных

Таблица: alpha1actalbumin     Filter i...

Фермент	Высвобожденные
Фильтр	Фильтр
1 Proteinase K	EQL - TKCEAF - QKL - KDL - KDY - GGV - SL - P - ...
2 Thermolysin	EQ - LTKCE - A - FQK - LKD - LKD - YGG - VS - ...
3 Pepsin pH >2	E - Q - L - T - K - CE - A - F - Q - K - L - K - D - L...
4 Trypsin	EQLTK - CEAFQK - LK - DLK - ...
5 Chymotrypsin A	EQL - TKCEAF - QKL - KDL - KDY - GGVSL - PEW ...
6 Chymotrypsin C	E - Q - L - TKCE - AFQ - KL - KDL - KDY - GGVSL ...

Таблица: beta1actoglobulin     Filter i...

Фермент	Высвобожденные
Фильтр	Фильтр
1 Proteinase K	I - I - V - TQTM - KGL - DI - QKV - AGTW - Y - S...
2 Thermolysin	I - I - VTQTMKG - LD - IQK - V - AGTW - YS - L - ...
3 Pepsin pH 1.3	IIVTQTMKGL - DIQKVAGTWYSL - AMAASDISL - L...
4 Pepsin pH >2	I - I - VT - Q - T - M - K - G - L - D - IQ - K - VA - ...
5 Trypsin	IIVTQTMK - GLDIQK - ...
6 Chymotrypsin A	IIVTQTM - KGL - DIQKVAGTW - Y - SL - AM - ...
7 Chymotrypsin C	IIVTQ - TM - KGL - DIQ - KVAGTW - Y - SL - AM ...

Рис. 5. Вид готовых таблиц с данными

Для создания программы для поиска ферментов по заданным пептидам или цепочке пептидов белков α -лактальбумин и β -лактоглобулин требуется подключение всех необходимых библиотек, также необходимо разработать интерфейс для программы и саму программу.

При запуске программы появляется окно (рис. 6), в котором можно выбрать *alpha1actalbumin* или *beta1actoglobulin*. В поле «Введите пептид» можно ввести пептид или цепочку пептидов в зависимости от их однобуквенного кода (табл. 3). В поле «Результаты поиска» отображаются результаты поиска после введения пептида или цепочки пептида и нажатия кнопки «Найти ферменты».

На рис. 7 приведен пример подбора ферментов для гидролиза α -лактальбумина с целью получения пептида EQL и гидролиза β -лактоглобулина с целью получения свободной аминокислоты изолейцина.

Примеры работы программы показали исправность работы программы, а именно программа выдаёт точный набор ферментов для получения пептида или цепочки пептидов в зависимости от предварительно выбранного для гидролиза белка.

Выводы

Проведен анализ баз данных, выявлены ферменты, необходимые для расщепления α -лактальбумина и β -лактоглобулина, а также определены результаты их действия и локализация выделяемых пептидов. Отбор ферментов проводился с использованием баз данных UniProtKB, AlphaFold Protein Structure Database и InterPro. Результаты действия ферментов и расположение освобожденных пептидов были получены с помощью BIOPEP-UWM.

На основании собранных данных разработан алгоритм создания базы данных для оценки воздействия ферментов на α -лактальбумин и β -лактоглобулин с использованием реляционной системы управления базами данных SQLite.

С помощью готовой базы данных и библиотеки Tkinter на языке программирования Python разработана программа для подбора ферментов по указанному пользователем пептиду.

Тестирование показало корректную работу программы по подбору ферментов согласно заданному пептиду.

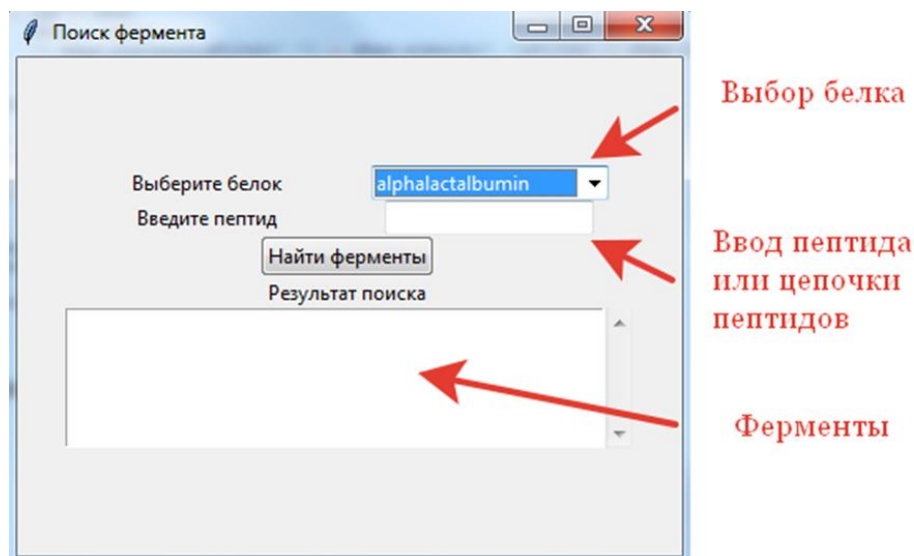


Рис. 6. Окно программы по поиску ферментов

Таблица 3

Обозначения аминокислот

Аминокислота	Однобуквенный код	Аминокислота	Однобуквенный код
Глицин	G	Треонин	T
Аланин	A	Аспарагиновая кислота	D
Валин	V	Глутаминовая кислота	E
Лейцин	L	Аспарагин	N
Изолейцин	I	Глутамин	Q
Пролин	P	Цистеин	C
Фенилаланин	F	Метионин	M
Тирозин	Y	Гистидин	H
Триптофан	W	Лизин	K
Серин	S	Аргинин	R

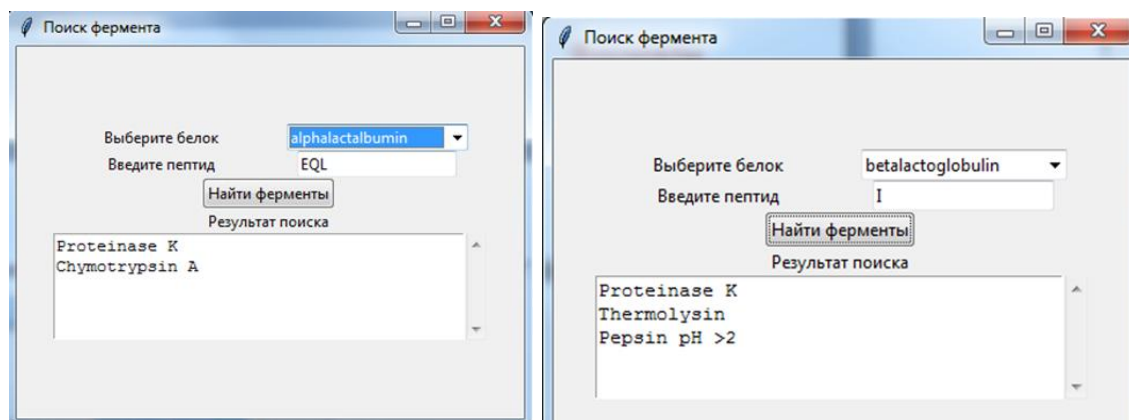


Рис. 7. Пример работы программы по поиску ферментов

Список литературы

1. Food waste recycling to Yarrowia biomass due to combined hydrothermal carbonization and biological treatment / W.A. Razaq, B. Matyjewicz, K. Świechowski et al. // *Journal of Cleaner Production*. 2024. No. 456. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.142385>.
2. A novel process for food waste recycling: A hydrophobic liquid mulching film preparation / J.-P. Zhang, J.-Q. Hou, M.-X. Li et al. // *J. Environmental Research*. 2022. No. 212. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.113332>.
3. Minimizing food waste in grocery store operations: Literature review and research agenda / L. Riesenegger, M.J. Santos, M. Ostermeier et al. // *J. Sustainability Analytics and Modeling*. 2023. No. 3. <https://doi.org/10.1016/j.samod.2023.100023>.
4. Филонов А.В., Крампит М.А., Романенко В.О. Современное состояние и перспективные направления использования вторичных материальных ресурсов пищевой промышленности // *Фундаментальные исследования*. 2017. № 5. С. 215–219.
5. Приказ Росприроднадзора от 22.05.2017 № 242 (ред. от 20.12.2024) «Об утверждении Федерального классификационного каталога отходов».
6. Гнездилова А.И. Концентрированные молочные продукты на основе молочной сыворотки // *Устойчивое развитие науки и образования*. 2019. № 11. С. 258–262.
7. Агаркова Е.Ю., Рязанцева К.А., Кручинин А.Г. Белки молочной сыворотки как источник антиоксидантных пептидов // *Сыроделие и маслоделие*. 2020. № 2. С. 57–58.
8. Bioactivities, Applications, Safety, and Health Benefits of Bioactive Peptides From Food and By-Products: A Review / A.A. Zaky, J. Simal-Gandara, J.-B. Eun et al. // *J. Frontiers in Nutrition*. 2021. No. 8. <https://doi.org/10.3389/fnut.2021.815640>.
9. Characterization of structure, physicochemical properties, and hypoglycemic activity of goat milk whey protein hydrolysate processed with different proteases / X. Du, H. Jing, L. Wang et al. // *LWT*. 2022. Vol. 159. 113257. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2022.113257>.
10. Evaluation and exploration of potentially bioactive peptides in casein hydrolysates against liver oxidative damage in STZ/HFD induced diabetic rats / C.Y. Wang, L. Zheng, G.W. Su et al. // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2020. Vol. 68 (8). P. 2393–2405.
11. Hau E.H., Li L., Mah S.H. Bioactive peptides from livestock milk and casein as alternative functional foods // *Food Safety and Health*. 2025. Vol. 3(1). P. 4–8. <https://doi.org/10.1002/fsh3.12083>
12. Иванов Н.В. Молекулярный in silico скрининг и докинг потенциальных ингибиторов активности ферментов растительного сырья // *Хранение и переработка сельхозсырья*. 2023. № 1. С. 117–135.
13. Никишина М.С., Мельников А.С. Скрининг активности новых гидразонов, на основе 6-метилурацила, in silico // *Вестник Башкирского государственного медицинского университета*. 2022. № 5. С. 44–47.
14. The InterPro Consortium: InterPro – an integrated documentation resource for protein families, domains and functional sites / R. Apweiler, T.K. Attwood, A. Bairoch et al. // *Bioinformatics*. 2000. Vol. 16. Iss. 12. P. 1145–1150. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/16.12.1145>.
15. Minkiewicz P., Iwaniak A., Darewicz M. BIOPEP-UWM Database of Bioactive Peptides: Current Opportunities // *J. Mol. Sci*. 2019. No. 20. <https://doi.org/10.3390/ijms20235978>.
16. Солтык С. SQLite – компактная встраиваемая система управления базами данных // *Technical Scientific Conference of Undergraduate, Master, PhD students, Technical University of Moldova*. 2023. Vol. I. P. 403–406.

References

1. Razaq W.A., Matyjewicz B., Świechowski K., Lazar Z., Kupaj P., Janek T., Valentin M., Białowiec A. Food waste recycling to Yarrowia biomass due to combined hydrothermal carbonization and biological treatment. *Journal of Cleaner Production*, 2024, no. 456. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.142385>.
2. Zhang J.-P., Hou J.-Q., Li M.-X., Yang T.-X., Xi B.-D. A novel process for food waste recycling: A hydrophobic liquid mulching film preparation. *J. Environmental Research*, 2022, no. 212. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2022.113332>.

3. Riesenegger L., Santos M. J., Ostermeier M., Martins S., Amorim P., Hübner A. Minimizing food waste in grocery store operations: Literature review and research agenda. *J. Sustainability Analytics and Modeling*, 2023, no. 3. <https://doi.org/10.1016/j.samod.2023.100023>.
4. Filonov A.V., Krampit M.A., Romanenko V.O. Current state and promising directions of using secondary material resources of the food industry. *Fundamental'nye issledovaniya* [Fundamental research], 2017, no. 5, pp. 215–219. (In Russ.)
5. Prikaz Rosprirodnadzora ot 22.05.2017 № 242 (red. ot 20.12.2024) «Ob utverzhdenii Federal'nogo klassifikatsionnogo kataloga otkhodov» [Order of Rosprirodnadzor dated 22.05.2017 No. 242 (as amended on 20.12.2024) “On approval of the Federal Classification Catalog of Waste”].
6. Gnezdilova A.I. Concentrated dairy products based on milk whey. *Ustoychivoe razvitie nauki i obrazovaniya*, 2019, no. 11, pp. 258–262. (In Russ.)
7. Agarkova E.Yu., Ryazantseva K.A., Kruchinin A.G. Whey proteins as a source of antioxidant peptides. *Syrodellie i maslodellie* [Cheesemaking and buttermaking], 2020, no. 2, pp. 57–58. (In Russ.)
8. Zaky A.A., Simal-Gandara J., Eun J.-B., Shim J.-H., El-Aty A.M.A. Bioactivities, Applications, Safety, and Health Benefits of Bioactive Peptides From Food and By-Products: A Review. *J. Frontiers in Nutrition*, 2021, no. 8. <https://doi.org/10.3389/fnut.2021.815640>.
9. Du X., Jing H., Wang L., Huang X., Wang X., Wang H. Characterization of structure, physico-chemical properties, and hypoglycemic activity of goat milk whey protein hydrolysate processed with different proteases. *LWT*, 2022, vol. 159. 113257. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2022.113257>.
10. Wang C.Y., Zheng L., Su G.W., Zeng X.A., Sun B.G., Zhao M.M. Evaluation and exploration of potentially bioactive peptides in casein hydrolysates against liver oxidative damage in STZ/HFD induced diabetic rats. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2020, vol. 68 (8), pp. 2393–2405.
11. Hau E.H., Li L., Mah S.H. Bioactive peptides from livestock milk and casein as alternative functional foods. *Food Safety and Health*, 2025, vol. 3(1). pp. 4–8. <https://doi.org/10.1002/fsh3.12083>
12. Ivanov N.V. Molecular in.silico screening and docking of potential inhibitors of enzyme activity of plant raw materials. *Khranenie i pererabotka sel'khozsyrya* [Storage and Processing of Farm Products], 2023, no. 1, pp. 117–135. (In Russ.)
13. Nikishina M.S., Mel'nikov A.S. Screening of the activity of new hydrazons based on 6-methyluracil, in silico. *Vestnik Bashkirskogo gosudarstvennogo meditsinskogo universiteta* [Bulletin of the Bashkir State Medical University], 2022, no. 5, pp. 44–47. (In Russ.)
14. Apweiler R., Attwood T. K., Bairoch A., Bateman A., Birney E., Biswas M., Bucher P., Cerutti L., Corpet F. et al. The InterPro Consortium: InterPro – an integrated documentation resource for protein families, domains and functional sites. *Bioinformatics*, 2000, vol. 16, iss. 12, pp. 1145–1150. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/16.12.1145>.
15. Minkiewicz P., Iwaniak A., Darewicz M., BIOPEP-UWM Database of Bioactive Peptides: Current Opportunities. *J. Mol. Sci.*, 2019, no. 20. <https://doi.org/10.3390/ijms20235978>.
16. Soltyk S. SQLite – kompaktная vstraivayemaya sistema upravleniya bazami dannykh [Soltyk S. SQLite – a compact embedded database management system]. *Technical Scientific Conference of Undergraduate, Master, PhD students, Technical University of Moldova*, 2023, vol. I, pp. 403–406.

Информация об авторах

Чанов Илья Михайлович, аспирант кафедры «Пищевые и биотехнологии», Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия; chanovi2000@mail.ru

Зинина Оксана Владимировна, доктор технических наук, профессор кафедры «Пищевые и биотехнологии», Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия; zininaov@susu.ru

Information about the authors

Ilya M. Chanov, postgraduate student of the Department of Food and Biotechnology, South Ural State University, Chelyabinsk, Russia; chanovi2000@mail.ru

Oksana V. Zinina, Doctor of Agricultural Sciences, Professor of Department of Food and Biotechnology, South Ural State University, Chelyabinsk, Russia; zininaov@susu.ru

Статья поступила в редакцию 20.02.2025

The article was submitted 20.02.2025