

Применение методов *in silico* при направленном гидролизе сывороточных белков

РЕЗЮМЕ

Актуальность. С одной стороны, молочная сыворотка является отходом молочной промышленности, образующимся в больших объемах, с другой, данное сырье — ценный источник полноценного белка и предшественник белковых гидролизатов, содержащих биоактивные пептиды. Технологию целевого получения определенных биоактивных пептидов при гидролизе белков можно совершенствовать, используя методы *in silico*.

Методы. Объектами исследований методом *in silico* являлись сывороточные белки — β-лактоглобулин и α-лактальбумин. Для анализа воздействия ферментов на биотехнологические свойства сывороточных белков использовалась база данных BIOPEP-UWM.

Результаты. Проведенные исследования сывороточных белков методом *in silico* позволили выявить наиболее эффективные ферменты для проведения гидролиза с целью получения биоактивных пептидов. Использование баз данных белков позволило установить ферменты, не расщепляющие изучаемые белки. В целом методы *in silico* способствуют совершенствованию технологии ферментативного гидролиза и на этапе разработки позволяют прогнозировать получение заданных активных пептидов, регулируя выбор фермента.

Ключевые слова: молочная сыворотка, активные пептиды, биоактивность, метод *in silico*

Для цитирования: Чанов И.М. Применение методов *in silico* при направленном гидролизе сывороточных белков. *Аграрная наука*. 2024; 384(7): 170–178.

<https://doi.org/10.32634/0869-8155-2024-384-7-170-178>

© Чанов И.М.

Application of *in silico* methods for targeted hydrolysis of whey proteins

ABSTRACT

Relevance. On the one hand, whey is a waste product of the dairy industry, generated in large volumes. On the other hand, this raw material is a valuable source of complete protein and a precursor to protein hydrolysates containing bioactive peptides. The technology for the targeted production of certain bioactive peptides from protein hydrolysis can be improved using *in silico* methods.

Methods. The objects of research using the *in silico* method were whey proteins — β-lactoglobulin and α-lactalbumin. The BIOPEP-UWM database was used to analyze the effects of enzymes on the biotechnological properties of whey proteins.

Results. The conducted *in silico* studies of whey proteins made it possible to identify the most effective enzymes for hydrolysis in order to obtain bioactive peptides. The use of protein databases made it possible to identify enzymes that do not break down the proteins being studied. In general, *in silico* methods contribute to the improvement of enzymatic hydrolysis technology and, at the development stage, make it possible to predict the production of given active peptides by regulating the choice of enzyme.

Key words: whey, active peptides, bioactivity, *in silico* method

For citation: Chanov I.M. Application of *in silico* methods for targeted hydrolysis of whey proteins. *Agrarian science*. 2024; 384(7): 170–178 (in Russian).

<https://doi.org/10.32634/0869-8155-2024-384-7-170-178>

© Chanov I.M.

Введение/Introduction

Пищевые отходы благодаря своей органической природе и массовому производству обладают большим потенциалом для вторичной переработки. Однако они требуют новых подходов к управлению и переработке. Вниманию мирового сообщества к проблеме переработки малоценного сельскохозяйственного сырья [1–4], непищевых органических отходов [5] и пищевых отходов резко возросло, что усугубляется экономическим развитием и увеличением численности населения [6]. Перенаселение, миграция людей в городские районы, развитие и экспансия городов привели к увеличению потребления продуктов питания, в том числе с заданными характеристиками (повышенными потребительскими свойствами) [7–11], и, следовательно, к увеличению количества различных видов отходов, в том числе пищевых.

Согласно Федеральному классификационному каталогу отходов, основными отходами молочной промышленности являются пахта, обезжиренное молоко, молочная сыворотка. В настоящее время лишь четверть произведенной молочной сыворотки направляется на промышленную обработку [12–14]. Большая часть ее, к сожалению, утекает в канализационную систему, приводя к загрязнению природных вод. Молочное производство в России обладает значительными запасами сыворотки, что подчеркивает необходимость разработки новых технологий и методов ее использования.

Сыворотка — это источник сывороточных белков, богатый минералами, витаминами и другими полезными веществами. Кроме того, исследования показывают, что сывороточные белки обладают защитной антиоксидантной активностью [15].

Первоначально молочную сыворотку рассматривали как загрязняющий элемент, восприятие ее изменилось после того, как были раскрыты ее многочисленные полезные и биологически активные характеристики [16]. Под воздействием ферментативного катализа получают белковые гидролизаты сыворотки, которые обладают рядом уникальных функций, обусловленных присутствием биологически активных пептидов [17].

Биоактивные пептиды — это фрагменты белка, которые полезны для систем организма и здоровья человека в целом. Большинство биоактивных пептидов имеют молекулярную массу от двух (дипептидов) до 20 аминокислотных остатков и молекулярную массу до 6000 Да. Биоактивные пептиды обладают рядом важных функций, таких как антиоксидантное, противовоспалительное, противоопухолевое, противомикробное и иммуномодулирующее действие в живом организме [18].

Для получения биоактивных пептидов они должны быть высвобождены из исходного белка, в состав которого входят и находятся в неактивной форме. Существуют различные методы, которые отвечают за выполнение этого действия посредством специфических механизмов, влияющих на состав, последовательность и длину аминокислот, входящих в состав пептида, вызывая изменение биологической активности в соответствии с используемым методом.

Многочисленные исследования показали, что биологическая активность пептидов связана с улучшением общего состояния здоровья и снижением риска определенных хронических заболеваний, таких как рак, диабет и болезни сердца [19, 20].

В настоящее время одним из методов теоретического прогнозирования активности

ферментов является использование молекулярного моделирования для изучения взаимодействия ферментов с субстратами. Для проведения таких исследований в виртуальной среде *in silico* применяются трехмерные структуры белков [21].

Использование компьютерного моделирования позволяет значительно сократить время, необходимое для обнаружения потенциальных биологических эффектов новых модификаций различных органических соединений [22].

Одно из направлений исследований, касающихся биоактивных пептидов, связано с использованием инструментов *in silico* для их анализа.

Методы *in silico*

1) Метод ADMET, который является инструментальным методом прогнозирования, базируется на создании обширных баз данных о существующих лекарственных веществах. Это уменьшает риски на последующих этапах испытаний и ускоряет процесс поиска благодаря прогнозированию на основе имеющихся данных. Данный метод помогает прогнозировать информацию об оптимальной дозе активной фармацевтической субстанции, частоте применения, наиболее эффективном способе введения, биодоступности, выведении, метаболизме и других характеристиках.

2) Молекулярное моделирование представляет собой метод, который показывает, как лекарственные препараты и другие химические вещества взаимодействуют с рецепторами клеток.

3) Моделирование целостной клетки: исследователи создали компьютерную модель переполненной внутренней части бактериальной клетки, которая в тестах по реакции на сахар в окружающей среде с точностью имитирует поведение настоящих клеток [23].

Инструменты *in silico* включают, например, базы данных белковых и пептидных последовательностей, программы для прогнозирования физико-химических свойств пептида и его биологической активности и программы, позволяющие осуществлять теоретический гидролиз белка с целью получения пептидов.

Технологии биоинформатики достаточно часто используются для изучения биологически активных пептидов, полученных из белков пищевых продуктов. Это возможно благодаря предоставленной информации о конформации, потенциальной активности, механизмах молекулярного воздействия и функциональных свойств пептида.

Наиболее распространенные базы данных и инструменты биоинформатики для анализа биоактивных пептидов *in silico* представлены в таблице 1.

Основные этапы применения подходов *in silico* представлены на рисунке 1.

Рис. 1. Основные этапы применения подходов *in silico* [25]

Fig. 1. Key steps for *in silico* approaches [25]

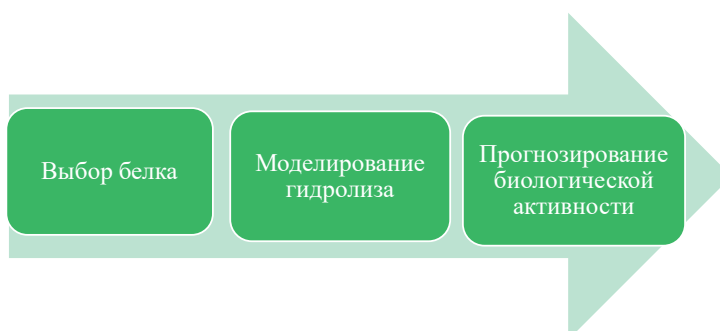
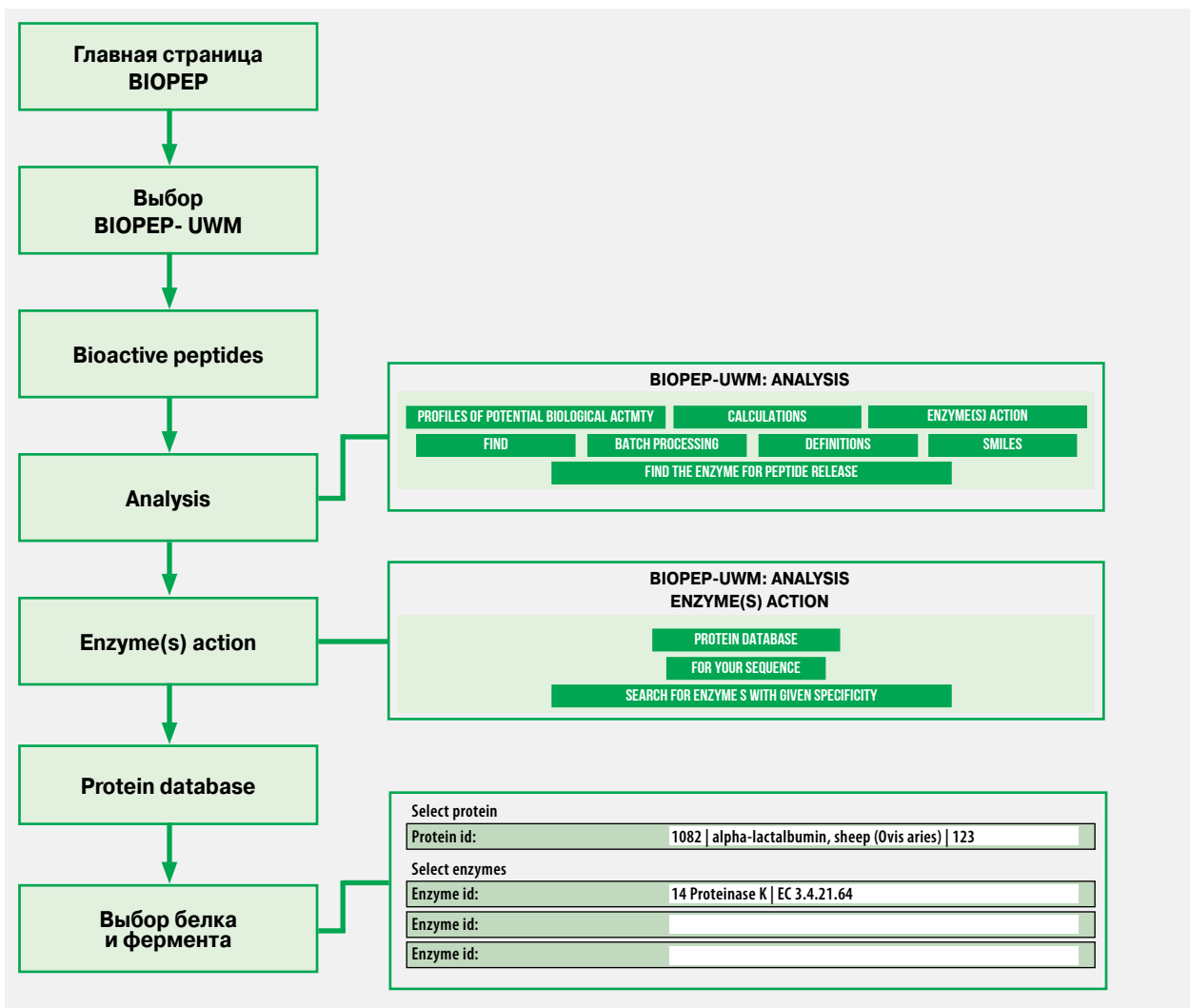


Таблица 1. Инструменты *in silico*, используемые для обнаружения биоактивных пептидов из пищевых белков [24]
Table 1. *In silico* tools used for the detection of bioactive peptides from food proteins [24]

База данных	Веб-сайт
UniProtKB	http://www.uniprot.org/
NCBI Protein	http://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein
BIOPEP-UWM	http://www.uwm.edu.pl/biochemia/
PepBank	http://pepbank.mgh.harvard.edu/
BioPD	http://biopd.bjmu.edu.cn/
SwePep	http://www.swepep.org/
EROP-Moscow	http://erop.inbi.ras.ru/
MilkAMP	http://milkampdb.org/
PeptideDB	http://www.peptides.be/
AMPer	http://marray.cmdr.ubc.ca/cgi-bin/amp.pl
PeptideCutter	http://web.expasy.org/peptide_cutter/
PoPS	http://pops.csse.monash.edu.au/pops.cgi/index.php
Enzyme Predictor	http://bioware.ucd.ie/~enzpred/Enzpred.php
PeptideRanker	http://bioware.ucd.ie/~compass/biowareweb/
AntiBP2	http://www.imtech.res.in/raghava/antibp2/
PeptideLocator	http://bioware.ucd.ie/
ToxinPred	http://www.imtech.res.in/raghava/toxinpred/
ProPeppe	https://propepper.net/
SORTALLER	http://sortaller.gzhmu.edu.cn/
BRENDA	https://www.brenda-enzymes.org/
CAZy	http://www.cazy.org/Welcome-to-the-Carbohydrate-Active.html
OmicTools	https://omictools.com

Рис. 2. Работа с базой данных BIOPEP-UWM

Fig. 2. Methodology for working with the BIOPEP-UWM database



Цель работы — анализ воздействия ферментов на биотехнологические свойства белков молочной сыворотки методом *in silico* с использованием базы данных BIOPEP-UWM.

Материалы и методы исследования / Materials and methods

Объектами исследований методом *in silico* являлись сывороточные белки β -лактоглобулин и α -лактальбумин. Для анализа воздействия ферментов на биотехнологические свойства сывороточных белков использовалась база данных BIOPEP-UWM. Методология работы с базой данных BIOPEP-UWM представлена на рисунке 2.

Для выбора ферментов использовалась база данных Peptide Cutter. Peptide Cutter предсказывает потенциальные места расщепления протеазами или химическими веществами в данной последовательности белка.

Для работы с базами данных соответствующие последовательности аминокислот для β -лактоглобулина и α -лактальбумина были загружены из базы данных белков UniProtKB или InterPro.

При помощи базы данных BIOPEP-UWM можно рассчитать биологическую активность высвобожденных пептидов, а именно теоретическую степень гидролиза (DH_t), частоту высвобождения фрагментов с заданной активностью выбранными ферментами (A_E) и относительную частоту высвобождения фрагментов с заданной активностью выбранными ферментами (W).

Расчет проводится базой данных по формулам (1) и (2):

$$A_E = d / N, \quad (1)$$

$$W = A_E / A, \quad (2)$$

где: d — количество фрагментов, высвобождаемых ферментами с заданной активностью из данной белковой последовательности; N — общее количество аминокислотных остатков в белковой цепи; A — частота встречаемости биологически активных фрагментов в белковой последовательности [25].

Результаты и обсуждение / Results and discussion

База данных в соответствии с запросом выводит список ферментов, которые расщепляют указанную аминокислотную последовательность, указывает количество расщеплений и их участки (рис. 3) и выводит список ферментов, которые не расщепляют последовательность (рис. 4).

Рис. 3. Список ферментов, расщепляющих указанную аминокислотную последовательность

Fig. 3. List of enzymes that cleave a specified amino acid sequence

These enzymes cleave the sequence:

Name of enzyme	No. of cleavages	Positions of cleavage sites
Ang-C proteinase	1	90
Asp-N endopeptidase	14	33 36 56 65 82 83 97 101 102 103 106 107 116 135
Asp-N endopeptidase + N-terminal Glu	21	20 26 30 33 36 44 56 65 68 82 83 97 101 102 103 106 107 116 132 135 140
BNPS-Skatole	4	46 80 124 138
CNBr	3	12 110
Chymotrypsin-high specificity (C-term to [FYW], not before P)	14	4 15 29 38 46 51 56 70 73 80 100 123 124 138
Chymotrypsin-low specificity (C-term to [FYWML], not before P)	38	1 2 4 7 8 9 10 14 15 16 23 29 32 35 38 46 51 52 56 70 72 73 80 88 100 101 105 110 116 123 124 125 127 130 135 138 139 143
Clostripain	1	90
Formic acid	14	34 37 57 66 83 84 98 102 103 104 107 108 117 136
Gutamyl endopeptidase	7	21 27 31 45 69 133 141
Iodosobenzoic acid	4	46 80 124 138
LysC	12	25 33 36 78 82 99 113 114 118 128 134 142
LysN	12	24 32 35 77 81 98 112 113 117 127 133 141
NTCB (2-nitro-5-thiocyanobenzoic acid)	8	25 47 80 92 96 110 130 139
Pepsin (pH 1.3)	35	3 4 6 7 8 9 10 13 14 15 22 23 28 29 31 32 34 43 50 51 71 72 73 99 100 104 105 124 125 134 135 138 139 142 143
Pepsin (pH > 2)	45	3 4 6 7 8 9 10 11 13 14 15 17 18 20 21 23 24 27 28 29 31 32 35 38 41 43 45 46 47 49 50 51 53 56 58 60 61 62 68 69 70 72 72 75 79 80 92 95 100 101 105 106 109 112 115 116 119 121
Proteinase K	69	123 124 125 126 129 130 133 135 138 139 141 143
Staphylococcal peptidase I	7	21 27 31 45 69 133 141
Thermolysin	43	1 3 4 6 7 8 9 10 12 13 14 16 19 22 28 40 46 49 50 59 60 61 71 72 74 78 91 94 99 100 109 111 114 115 118 120 124 125 128 129 134 138 142
Trypsin	12	25 33 36 78 90 99 113 114 118 128 134 142

Таблица 2. Результаты действия ферментов на β-лактоглобулин

Table 2. Results of the action of enzymes on β-lactoglobulin

Фермент	Результат действия ферментов и высвобождаемые пептиды
протеиназа К	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 - ENGECQKKI - I - AEKTKI - P - AV - F - KI - DAL - NENKV - L - V - L - DTDY - KKY - L - L - F - CM - ENSAEP - EQSL - ACQCL - V - RTP - EV - DNEAL - EKF - DKAL - KAL - P - M - HI - RL - AF - NP - TQL - EGQCHV Search for active fragments CALCULATE A<sub>E</sub>, D<sub>H</sub>, W, B<sub>E</sub>, 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]

Для последующего анализа из представленных расщепляющих ферментов были выбраны с наибольшим количеством расщеплений: протеиназа К, термолизин, пепсин (pH 1.3), пепсин (pH > 2), трипсин, химотрипсин А, химотрипсин С.

Результаты действия ферментов на β-лактоглобулин и α-лактальбумин, а также активность этих ферментов, приведены в таблицах 2, 3.

Рис. 4. Список ферментов, не расщепляющих заданную аминокислотную последовательность

Fig. 4. List of enzymes that do not cleave a given amino acid sequence

These chosen enzymes do not cut:			
№		№	
1	Caspase1	10	Caspase9
2	Caspase10	11	Enterokinase
3	Caspase2	12	Factor Xa
4	Caspase3	13	GranzymeB
5	Caspase4	14	Hydroxylamine
6	Caspase5	15	Proline-endopeptidase
7	Caspase6	16	Thrombin
8	Caspase7	17	Tobacco etch virus protease
9	Caspase8		

(Продолжение таблицы 2.)

термолизин	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 - L - L - LQKWENGEC - AQKK - I - I - AEKTK - IP - A - V - FK - ID - A - L - NENK - 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_c, 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]
пепсин pH 1,3	Results of enzyme action IIVTQTMKGL - DIQKVAGTWYSL - AMAASDISL - L - DAQSAPL - RVYVEEL - KPTPEGNL - EIL - L - QKWENGEC - AQKKIAEKTIPAVF - KIDAL - NENKVL - VL - DTDYKKYL - L - F - CMENSAEPEQSL - ACQCL - VRTPEVDNEAL - EKF - DKAL - PMHIRL - AF - NPTQL - EGQCHV Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_c, 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]
пепсин 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_c, 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]
трипсин	Results of enzyme action IIVTQTMK - GLDIQK - VAGTWYSLAMAASDISLLDAQSAPLR - VYVEELK - PTPEGNLEILLQK - WENGECQK - K - IIAEK - TK - IPAQVK - IDALNENK - VLVDTDYK - K - YLLFCMENSAEPEQSLACQCLVR - TPEVDNEALEK - FDK - ALK - ALPMHIR - LAFNPTQLEGQCHV Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_c, 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]
химотрипсин А	Results of enzyme action IIVTQTM - KGL - DIQKVAGTW - Y - SL - AM - AASDISL - L - DAQSAPL - RVY - VEEL - KPTPEGN - L - EIL - L - QKW - EN - GECQK - KIIAEK - KIPAVF - 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_c, 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]
химотрипсин С	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 - KIIAE - KTKIP - AVFKIDAL - N - E - N - KVL - VL - DTDY - KKY - L - L - FCM - E - N - SAE - P - E - Q - SL - ACQ - CL - VRTPE - E - VDN - E - AL - E - KFDKAL - KAL - P - M - HIRL - AFN - P - Q - L - E - G - Q - CHV Search for active fragments CALCULATE A_E, DH_c, 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]

Таблица 3. Результаты действия ферментов на α -лактальбумин
Table 3. The results of the action of enzymes on α -lactalbumin

Фермент	Результат действия ферментов и высвобождаемые пептиды
протеиназа К	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 fragmentsCALCULATE A_E, DH_t, 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]
термолизин	Results of enzyme action EQ - LTKCE - A - FQK - LKD - LKD - YGG - VS - LPEW - VCT - A - FHTSG - YDTQ - A - I - VQNNDSSTE - 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 fragmentsCALCULATE 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]
пепсин 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 - 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 fragmentsCALCULATE 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]
трипсин	Results of enzyme action EQLTK - CEAFQK - LK - DLK - DYGGVSLPEWVCTAFHTSGYDTQAIQNNDSSTEYGLFQINN - IWCK - DDQNPHSR - NICNISCDK - FLDDDLTDDIVCAK - K - ILDK - VGINYWLAHK - ALCSEK - LDQWLCEK - L Search for active fragmentsCALCULATE 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]
химотрипсин А	Results of enzyme action EQL - TKCEAF - QKL - KDL - KDY - GGVSL - PEW - VCTAF - H - TSGY - DTQAIQON - N - DSTEY - GL - F - QIN - N - KIW - CKDDQN - PH - SRN - ICN - ISCDKF - L - DDDL - TDDIVCAKKIL - DKVGIN - Y - W - L - AH - KAL - CSEKL - DQW - L - CEKL Search for active fragmentsCALCULATE 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]
химотрипсин С	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 - TDDIVCAKKIL - DKVGIN - Y - W - L - AHKAL - CSE - KL - DQ - W - L - CE - KL Search for active fragmentsCALCULATE 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]
трипсин	Results of enzyme action IIVTQTMK - GLDIQK - VAGTWYSLAMAASDISLLDAQSAPLR - VYVEELK - PTEGNEILLQK - WENGECQK - K - IIAEK - TK - IPAVFK - IDALNENK - VLVDTDYK - K - YLLFCMENSAPESQSLACQLVR - TPEVDNEALEK - FDK - ALK - ALPMHIR - LAFNPTQLEGQCHV Search for active fragmentsCALCULATE A_E, DH_t, 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]

(Продолжение таблицы 3.)

химотрипсин А	Results of enzyme action IIVTQTM - KGL - DIQKVAGTW - Y - SL - AM - AASDISL - L - DAQSAPL - RVY - VEEL - KPTPEGN - L - EIL - L - QKW - EN - GECQAQKKIAEKTIPAVF - 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<sub>E</sub>, DH<sub>t</sub>, W, B<sub>E</sub>, 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]

Теоретическая степень гидролиза, частота высвобождения фрагментов с заданной активностью выбранными ферментами и относительная частота высвобождения фрагментов с заданной активностью выбранными ферментами для α -лактальбумина представлены в таблице 4, для β -лактоглобулина — в таблице 5.

Таблица 4. Активность ферментов на α -лактальбумин

Table 4. Enzyme activity on α -lactalbumin

Протеиназа К		
DH _t	31,9672	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0325	0,0740
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0488	0,0834
Ингибитор ГМГ — КоА-редуктазы	0,0081	1,0000
Регулирующая	0,0081	0,3320
Термолизин		
DH _t	32,7869	
Активность	A _E	W
Иммуномодулирующая	0,0163	0,5015
Ингибитор АПФ	0,0488	0,1112
Антиоксидантная	0,0081	0,0996
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0488	0,0834
Ингибитор дипептидилпептидазы III	0,0081	0,1424
Противовоспалительная	0,0081	1,0000
Пепсин (pH > 2)		
DH _t	72,1311	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0569	0,1296
Стимулирующая	0,0081	0,1990
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0650	0,1110
Ингибитор дипептидилпептидазы III	0,0163	0,2865
Ингибитор альфа-глюкозидазы	0,0081	0,4969
Нейропептид	0,0081	1,0000
Трипсин		
DH _t	11,4754	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0081	0,0185
Антибактериальная	0,0163	0,5015
Антиоксидантная	0,0163	0,2005
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0081	0,0138
Химотрипсин А		
DH _t	28,6885	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0244	0,0556
Антибактериальная	0,0081	0,2492
Антиоксидантная	0,0081	0,0996
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0244	0,0417
Химотрипсин С		
DH _t	35,2459	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0407	0,0927
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0325	0,0555

Таблица 5. Активность ферментов на β -лактоглобулин

Table 5. Enzyme activity on β -lactoglobulin

Протеиназа К		
DH _t	38,5093	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0432	0,0752
Антиоксидантная	0,0185	0,0681
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0741	0,1111
Ингибитор дипептидилпептидазы III	0,0062	0,0628
Регулирующая	0,0123	0,4980
Термолизин		
DH _t	39,7516	
Активность	A _E	W
Ингибитор ренина	0,0123	0,6649
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0247	0,0370
Ингибитор АПФ	0,0370	0,0644
Антиоксидантная	0,0123	0,0453
CaMPDE ингибитор	0,0062	0,5041
Ингибитор дипептидилпептидазы III	0,0062	0,0628
Ингибитор альфа-глюкозидазы	0,0062	0,1676
Пепсин (pH 1,3)		
DH _t	15,5280	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0062	0,0108
Стимулирующий	0,0062	0,0773
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0123	0,0184
Пепсин (pH > 2)		
DH _t	75,7764	
Активность	A _E	W
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,1235	0,1852
Ингибитор АПФ	0,0617	0,1075
Антиоксидантная	0,0123	0,0453
Стимулирующая	0,0185	0,2307
Ингибитор дипептидилпептидазы III	0,0247	0,2500
Ингибитор альфа-глюкозидазы	0,0247	0,6676
Регулирующая	0,0123	0,4980
Нейропептид	0,0062	0,1435
Ингибитор Хаа-рго	0,0062	1,0000
Ингибитор лактоцепина	0,0062	1,0000
Трипсин		
DH _t	11,1801	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0309	0,0538
Антибактериальная	0,0123	0,4980
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0185	0,0277
Гипохолестеринемическая	0,0062	0,5041
Химотрипсин А		
DH _t	27,3292	
Активность	A _E	W
Ингибитор АПФ	0,0185	0,0322
Стимулирующая	0,0062	0,0773
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0247	0,0370
Антиоксидантная	0,0123	0,0453
Регулирующая	0,0062	0,2510

(Продолжение таблицы 5.)

Химотрипсин С		
DN _i	43,4783	
Активность	A _E	W
Нейропептид	0,0185	0,4282
Ингибитор АПФ	0,0617	0,1075
Гипохолестеринемическая	0,0062	0,5041
Антиоксидантная	0,0309	0,1138
Стимулирующая	0,0123	0,1534
Ингибитор дипептидилпептидазы IV	0,0741	0,1111
Ингибитор дипептидилпептидазы III	0,0062	0,0628
Ингибитор альфа-глюкозидазы	0,0062	0,1676
Регулирующая	0,0123	0,4980

Все данные, полученные из базы данных BIOPEP-UWM, необходимы для создания собственной базы данных, на основе которой планируется разработка

программы для поддержки принятия решений, то есть для выбора необходимого фермента для расщепления белков α-лактальбумина и β-лактоглобулина с получением активных пептидов.

Выводы/Conclusions

Результаты работы показали, что применение методов *in silico* позволяет быстро установить целесообразность ферментации сывороточных белков тем или иным ферментом, а также выявить возможные биоактивные пептиды при направленном гидролизе белков. Современные базы данных белков и пептидов значительно повышают эффективность проведения исследований в области получения биоактивных пептидов с определенной активностью

Автор несет ответственность за работу и представленные данные. Автор несет ответственность за плагиат. Автор объявил об отсутствии конфликта интересов.

The author is responsible for the work and the submitted data. The author is responsible for plagiarism. The author declared no conflict of interest.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Тарасова И.В., Ребезов М.Б., Зинина О.В., Максимюк Н.Н. Подбор микроорганизмов для обработки коллагенсодержащего сырья. Научное обеспечение инновационного развития животноводства. *Сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции*. Жодино: Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по животноводству. 2013; 470–472. <https://www.elibrary.ru/mfpjpy>

2. Бекешова Г.Б., Ибрагимов Н.К., Какимов А.К., Суйчинов А.К., Есимбеков Ж.С., Ребезов М.Б. Влияние комбинированного измельчения на технологические характеристики мясного фарша. *Все о мясе*. 2022; 5: 32–37. <https://doi.org/10.21323/2071-2499-2022-5-32-37>

3. Ребезов М.Б. Биотехнологические решения переработки отходов зерноперерабатывающих предприятий. *Наука ЮУрГУ. Материалы 66-й научной конференции*. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. 2014; 294–298. <https://www.elibrary.ru/ssqpyx>

4. Зинина О.В., Меренкова С.П., Ребезов М.Б., Вишнякова Е.А. Исследование свойств белковых гидролизатов, полученных из желудков цыплят-бройлеров, как потенциального компонента биоактивных пленочных покрытий. *Пищевые системы*. 2024; 7(1): 44–51. <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2024-7-1-44-51>

5. Максимюк Н.Н., Некрасов А.В., Трофимова В.А., Ребезов М.Б. Разработка технологии переработки непищевых органических отходов. *Современное состояние и перспективы развития пищевой промышленности и общественного питания. Сборник материалов III Всероссийской научно-практической конференции с международным участием*. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. 2010; 1: 82–83. <https://www.elibrary.ru/zadzxs>

6. Rasaq W.A. *et al.* Food waste recycling to Yarrowia biomass due to combined hydrothermal carbonization and biological treatment. *Journal of Cleaner Production*. 2024; 456: 142385. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.142385>

7. Abilmazhinov Y., Rebezov M., Fedoseeva N., Nikolaeva N., Sepiashvili E. Enhancing Nutritional Value and Safety in Horse Meat Cutlets with Pumpkin Additives. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2023; 1242: 012023. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1242/1/012023>

8. Kalibekkyzy Z., Neverova O., Rebezov M., Fedoseeva N., Vasilievich N. Improved Organoleptic Properties in Cooked Sausages through a Mutton-Poultry Blend: An Analytical Study. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2023; 1242: 012026. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1242/1/012026>

9. Pergentino dos Santos S. *et al.* Interaction of heat transfer methods, storage temperature and packaging atmosphere on quality of processed chicken meat. *Journal of Microbiology, Biotechnology and Food Sciences*. 2023; 13(2): e10251. <https://doi.org/10.55251/jmbfs.10251>

10. Нургазезова А.Н., Спанова А.М., Ребезов М.Б., Жакупбекова Ш.К., Кабаева К. Использование мяса кролика и шрота расторопши в низкокалорийном мясном продукте. *Вестник Университета Шакарима. Серия: Технические науки*. 2024; 1: 208–216 (на казах. яз.). [https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1\(13\)-26](https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1(13)-26)

11. Махмудов Ф.А., Азимова С.Т., Ребезов М.Б., Изтаев А.И., Конарбаева З.К. Технология производства и качество выпеченного хлеба из цельнозерновой пшеничной муки. *Вестник Университета Шакарима. Серия: Технические науки*. 2024; 1: 165–173. [https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1\(13\)-21](https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1(13)-21)

12. Коростелева Л.А., Баймишев Р.Х., Романова Т.Н., Долгошева Е.В., Сухова И.В., Канаев М.А. Разработка биопродуктов функционального назначения на основе побочных продуктов переработки молока (сыворотки). Монография. Кинель: Самарский государственный аграрный университет. 2022; 152. ISBN 978-5-88575-679-2 <https://www.elibrary.ru/yubdws>

REFERENCES

1. Tarasova I.V., Rebezov M.B., Zinina O.V., Maksimuk N.N. Selection of microorganisms for processing collagen-containing raw materials. *Scientific support for innovative development of livestock farming. Collection of scientific papers based on proceedings of the International scientific and practical conference*. Zhodino: Scientific and Practical Center of the National Academy of Sciences of Belarus on Animal Husbandry. 2013; 470–472 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/mfpjpy>

2. Bekeshova G.B., Ibragimov N.K., Kakimov A.K., Suychinov A.K., Yesimbekov Zh.S., Rebezov M.B. The effect of combined grinding on the technological characteristics of ground meat. *Vsyo o myase*. 2022; 5: 32–37 (in Russian). <https://doi.org/10.21323/2071-2499-2022-5-32-37>

3. Rebezov M.B. Biotechnological solutions for processing waste from grain processing enterprises. *SUSU Science. Proceedings of the 66th scientific conference*. Chelyabinsk: South Ural State University. 2014; 294–298 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/ssqpyx>

4. Zinina O.V., Merenkova S.P., Rebezov M.B., Vishnyakova E.A. Research of the properties of protein hydrolysates obtained from the broiler chicken gizzards as a potential component of bioactive film coatings. *Food systems*. 2024; 7(1): 44–51 (in Russian). <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2024-7-1-44-51>

5. Maksimuk N.N., Nekrasov A.V., Trofimova V.A., Rebezov M.B. Development of technology for processing non-food organic waste. *Current state and prospects for the development of the food industry and public catering. Collection of proceedings of the III All-Russian scientific and practical conference with international participation*. Chelyabinsk: South Ural State University. 2010; 1: 82–83 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/zadzxs>

6. Rasaq W.A. *et al.* Food waste recycling to Yarrowia biomass due to combined hydrothermal carbonization and biological treatment. *Journal of Cleaner Production*. 2024; 456: 142385. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.142385>

7. Abilmazhinov Y., Rebezov M., Fedoseeva N., Nikolaeva N., Sepiashvili E. Enhancing Nutritional Value and Safety in Horse Meat Cutlets with Pumpkin Additives. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2023; 1242: 012023. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1242/1/012023>

8. Kalibekkyzy Z., Neverova O., Rebezov M., Fedoseeva N., Vasilievich N. Improved Organoleptic Properties in Cooked Sausages through a Mutton-Poultry Blend: An Analytical Study. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. 2023; 1242: 012026. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1242/1/012026>

9. Pergentino dos Santos S. *et al.* Interaction of heat transfer methods, storage temperature and packaging atmosphere on quality of processed chicken meat. *Journal of Microbiology, Biotechnology and Food Sciences*. 2023; 13(2): e10251. <https://doi.org/10.55251/jmbfs.10251>

10. Nurgazezova A.N., Spanova A.M., Rebezov M.B., Zhakupbekova Sh.K., Kabaeva K.M. The use of rabbit meat and milk thistle meal in a low-calorie meat product. *Bulletin of Shakarim University. Technical Sciences*. 2024; 1: 208–216 (in Kazakh). [https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1\(13\)-26](https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1(13)-26)

11. Makhmudov F.A., Asimov S.T., Rebezov M.B., Iztaev A.I., Konarbayeva Z.K. Technology for production and quality of bread baked from whole grind wheat flour. *Bulletin of Shakarim University. Technical Sciences*. 2024; 1: 165–173 (in Russian). [https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1\(13\)-21](https://doi.org/10.53360/2788-7995-2024-1(13)-21)

12. Korosteleva L.A., Baimishev R.Kh., Romanova T.N., Dolgoшева E.V., Sukhova I.V., Kanaev M.A. Development of functional bioproducts based on by-products of milk processing (whey). Monograph. Kinel: *Samara State Agrarian University*. 2022; 152 (in Russian). ISBN 978-5-88575-679-2 <https://www.elibrary.ru/yubdws>

13. Ребезов М.Б., Зинина О.В., Нурымхан Г.Н., Нургазезова А.Н., Смольникова Ф.Х. Вторичное сырье молочной отрасли: современное состояние и перспективы использования. *АПК России*. 2016; 23(2): 482–487. <https://www.elibrary.ru/wcfffsh>
14. Наурзбаева Г.К., Смольникова Ф.Х., Ребезов М.Б. Исследование сливочного масла с растительными наполнителями. *Наука. Образование. Инновации. Сборник материалов II Международной научно-практической конференции*. Мелеуз: Башкирский институт технологий и управления (филиал) Московского государственного университета технологий и управления им. К.Г. Разумовского (Первого казачьего университета). 2020; 74–78. <https://www.elibrary.ru/vwbfcc>
15. Гнездилова А.И. Концентрированные молочные продукты на основе молочной сыворотки. *Устойчивое развитие науки и образования*. 2019; 11: 258–262. <https://www.elibrary.ru/bmcyrh>
16. Николина А.Д., Баландина В.А., Зинина О.В. Разработка и исследование ферментированного напитка для школьного питания. *Вестник биотехнологии*. 2023; 4: 12. <https://www.elibrary.ru/yzvvhx>
17. Агаркова Е.Ю., Рязанцева К.А., Кручинин А.Г. Белки молочной сыворотки как источник антиоксидантных пептидов. *Сыроделие и маслоделие*. 2020; 2: 57–58. <https://doi.org/10.31515/2073-4018-2020-2-55-56>
18. Zaky A.A., Simal-Gandara J., Eun J.-B., Shim J.-H., Abd El-Aty A.M. Bioactivities, Applications, Safety, and Health Benefits of Bioactive Peptides From Food and By-Products: A Review. *Frontiers in Nutrition*. 2021; 8: 815640. <https://doi.org/10.3389/fnut.2021.815640>
19. Зинина О.В., Николина А.Д., Хвостов Д.В., Ребезов М.Б., Завьялов С.Н., Ахмедзянов Р.В. Белковый гидролизат как источник биоактивных пептидов в пищевой продукции диетического питания. *Пищевые системы*. 2023; 6(4): 440–448. <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2023-6-4-440-448>
20. Иванов Н.В. Молекулярный *in silico* скрининг и докинг потенциальных ингибиторов активности ферментов растительного сырья. *Хранение и переработка сельхозсырья*. 2023; 1: 117–135. <https://doi.org/10.36107/spfp.2023.399>
21. Zinina O., Neverova O., Sharaviev P., Neverova E., Aleksandrina E. Determination of the functional properties of protein hydrolysates by the *in silico* method. *E3S Web of Conferences*. 2023; 395: 03004. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202339503004>
22. Чиряпкин А.С., Глушко А.А., Чиряпкин В.С., Гендугов Т.А. Методы и достижения компьютерного моделирования клетки. *Бюллетень науки и практики*. 2019; 5(5): 128–135. <https://doi.org/10.33619/2414-2948/42/17>
23. Barati M. *et al.* Techniques, perspectives, and challenges of bioactive peptide generation: A comprehensive systematic review. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*. 2020; 19(4): 1488–1520. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12578>
24. Mora L., Gallego M., Toldrá F. ACEI-Inhibitory Peptides Naturally Generated in Meat and Meat Products and Their Health Relevance. *Nutrients*. 2018; 10(9): 1259. <https://doi.org/10.3390/nu10091259>
25. Du X., Jing H., Li Wang, Huang X., Wang X., Wang H. Characterization of structure, physicochemical properties, and hypoglycemic activity of goat milk whey protein hydrolysate processed with different proteases. *LWT — Food Science and Technology*. 2022; 159: 113257. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2022.113257>

ОБ АВТОРАХ

Илья Михайлович Чанов

студент

<https://orcid.org/0000-0001-7484-3252>

chanovi2000@mail.ru

Южно-Уральский государственный университет,
пр. им. Ленина, 76, Челябинск, 454080, Россия

13. Rebezov M.B., Zinina O.V., Nurymkhan G.N., Nurgazezova A.N., Smolnikova F.H. Secondary raw for milk industry: current state and prospects. *AGRO-industrial complex of Russia*. 2016; 23(2): 482–487 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/wcfffsh>
14. Naurzbayeva G.K., Smolnikova F.H., Rebezov M.B. The study of butter with vegetable fillers. *Science. Education. Innovation. Collection of proceedings of the II International Scientific and Practical Conference*. Meleuz: Bashkir Institute of Technology and Management (branch) of K.G. Razumovsky Moscow State University of Technologies and Management (the First Cossack University). 2020; 74–78 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/vwbfcc>
15. Gnezdilova A.I. Concentrated dairy products with milk whey. *Ustoychivoye razvitiye nauki i obrazovaniya*. 2019; 11: 258–262 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/bmcyrh>
16. Nikolina A.D., Balandina V.A., Zinina O.V. Development and research of a fermented whey drink for school meals. *Bulletin of biotechnology*. 2023; 4: 12 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/yzvvhx>
17. Agarkova E.Yu., Ryzantseva K.A., Kruchinin A.G. Whey proteins as a source of antioxidant peptides. *Cheesemaking and buttermaking*. 2020; 2: 57–58 (in Russian). <https://doi.org/10.31515/2073-4018-2020-2-55-56>
18. Zaky A.A., Simal-Gandara J., Eun J.-B., Shim J.-H., Abd El-Aty A.M. Bioactivities, Applications, Safety, and Health Benefits of Bioactive Peptides From Food and By-Products: A Review. *Frontiers in Nutrition*. 2021; 8: 815640. <https://doi.org/10.3389/fnut.2021.815640>
19. Zinina O.V., Nikolina A.D., Khvostov D.V., Rebezov M.B., Zavyalov S.N., Akhmedzyanov R.V. Protein hydrolysate as a source of bioactive peptides in diabetic food products. *Food systems*. 2023; 6(4): 440–448 (in Russian). <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2023-6-4-440-448>
20. Ivanov N.V. Molecular *in silico* screening and docking of potential inhibitors of enzyme activity of plant raw materials. *Storage and Processing of Farm Products*. 2023; 1: 117–135 (in Russian). <https://doi.org/10.36107/spfp.2023.399>
21. Zinina O., Neverova O., Sharaviev P., Neverova E., Aleksandrina E. Determination of the functional properties of protein hydrolysates by the *in silico* method. *E3S Web of Conferences*. 2023; 395: 03004. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202339503004>
22. Chiryapkin A., Glushko A., Chiryapkin V., Gendugov T.A. Methods and achievements of computer simulation of cell. *Bulletin of Science and Practice*. 2019; 5(5): 128–135 (in Russian). <https://doi.org/10.33619/2414-2948/42/17>
23. Barati M. *et al.* Techniques, perspectives, and challenges of bioactive peptide generation: A comprehensive systematic review. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*. 2020; 19(4): 1488–1520. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12578>
24. Mora L., Gallego M., Toldrá F. ACEI-Inhibitory Peptides Naturally Generated in Meat and Meat Products and Their Health Relevance. *Nutrients*. 2018; 10(9): 1259. <https://doi.org/10.3390/nu10091259>
25. Du X., Jing H., Li Wang, Huang X., Wang X., Wang H. Characterization of structure, physicochemical properties, and hypoglycemic activity of goat milk whey protein hydrolysate processed with different proteases. *LWT — Food Science and Technology*. 2022; 159: 113257. <https://doi.org/10.1016/j.lwt.2022.113257>

ABOUT THE AUTHORS

Ilya Mikhailovich Chanov

Student

<https://orcid.org/0000-0001-7484-3252>

chanovi2000@mail.ru

South Ural State University,
76 Lenin Ave., Chelyabinsk, 454080, Russia