

профессионального образования "Кемеровский технологический институт пищевой промышленности"

THE USE OF SUBLIMATING CARBON DIOXIDE FOR FOOD COOLING

Bredikhin Sergey Alekseevich, PhD, Professor of the Department of Processes and Devices of Processing Industries, Russian State Agrarian University – Moscow Timiryazev Agricultural Academy, e-mail: sbredihin_kpia@rgau-msha.ru

Aldamatov Nursultan Esenbekovich, postgraduate student of the Department of Processes and Devices of Processing Industries, Russian State Agrarian University – Moscow Timiryazev Agricultural Academy, e-mail: Status_Diamond@bk.ru

Russian State Agrarian University – Moscow Timiryazev Agricultural Academy,
Russia, Moscow, e-mail: rector@rgau-msha.ru

Abstract: *This article presents carbon dioxide as a refrigerating agent for cooling food products in direct contact with a gas-air mixture of sublimating carbon dioxide.*

Key words: *sublimation, CO₂, cooling, carbon dioxide, food, refrigeration.*

УДК 663.051. 2

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПИЩЕВЫХ ДОБАВОК

Володарский Михаил Олегович, студент Университета ИТМО факультета биотехнологий, e-mail: michael.volodarsky@yandex.ru

Филозон Владислав Сергеевич, студент Университета ИТМО факультета биотехнологий, e-mail: fllozop@yandex.com

Осьмак Ольга Олеговна, инженер Университета ИТМО НОЦ ИнфоХимии, e-mail: Osmak21@yandex.ru

Смирнов Игорь Сергеевич, студент Университета ИТМО факультета биотехнологий, e-mail: is_smirnov@itmo.ru

Ашихмина Мария Сергеевна, инженер Университета ИТМО НОЦ ИнфоХимии, e-mail: msashikhmina@itmo.ru

Университет ИТМО, Россия, Санкт-Петербург, e-mail: od@itmo.ru

Аннотация: Восприятие продуктов — это мультисенсорные ощущения, сочетающие вкус, запах, химическое раздражение или тактильное воздействие. Создание базы данных вкусовых добавок позволяет сделать процесс поиска новых соединений быстрым и дешевым. Инструменты *in silico*, основанные на лигандах и структурах, вносят свой вклад в создание новых инструментов управления интенсивностью вкуса молекул.

Ключевые слова: вкусовые рецепторы, умами, машинное обучение, *in silico*, база данных.

В наше время необходимость использовать методы *in silico* становится все более важным и приоритетным в науке, промышленности и других областях из-за своей эффективности и экономии ресурсов. В науке данные методы помогают исследователям производить виртуальные эксперименты, анализировать данные и предсказывать результаты, что ускоряет процесс исследования, обеспечивая глубокое понимание фундаментальных принципов. В промышленности методы *in silico* помогают оптимизировать производственные процессы, проектировать новые материалы и продукты, моделировать сложные системы, а также предвидеть и устранять возможные проблемы еще на этапе разработки. Это существенно уменьшает время производства и ресурсы, необходимые для исследований.

В пищевой промышленности методы *in silico* позволяют оптимизировать поиск пищевых добавок, оказывающих положительное влияние на здоровье человека. Исследование натуральных пищевых добавок, прогнозирование интенсивности вкуса, определение пользы, подбор концентрации требуют привлечения методов *in silico*, помогающих справляться с этими важными задачами.

Различные типы клеток в полости рта экспрессируют уникальные рецепторы, настроенные на каждую вкусовую модальность. Инструменты *in silico*, основанные на лигандах и структурах, способствуют появлению новых инструментов для скрининга молекул, которые могут регулировать интенсивность вкуса продуктов. Молекулярное моделирование позволяет исследовать взаимодействие вкусовых рецептором и вкусовых молекул, что позволяет проводить поиск новых вкусовых сочетаний.

Целью данного исследования было обнаружить взаимосвязь между аминокислотным составом пептидов с интенсивностью вкуса умами и энергией связывания с рецепторами. Задачи, которые были поставлены и решены в ходе исследования: сбор базы данных, расчет энергии связывания с помощью молекулярного докинга, разработка алгоритма, предсказывающего новые соединения умами и их интенсивность вкуса.

Объектом исследования являются аминокислотные последовательности, обладающие способностью связываться с вкусовыми рецепторами, придающие вкус умами. В данном исследовании база данных (880 записей) была собрана из открытых литературных источников. Она включает в себя аминокислотные последовательности (пептиды). После сбора данных был проведен молекулярный докинг с целью получения значений свободной энергии Гиббса связывания между пептидами, которые, вероятно, дают вкус умами, и рецепторами T1R2a-T1R3. Критическое значение энергии связывания является -6 ккал/моль, при которой лиганд прочно связывается с рецептором, придавая вкус [1]. Средняя свободная энергия Гиббса связывания между рецепторами и пептидами составляет около -8 ккал/моль. Все данные, полученные с помощью молекулярного докинга и ручного сбора данных, были использованы с целью обучения моделей для прогнозирования способности соединений придавать и

усиливать вкус умами. Так, после применения молекулярного докинга база данных содержала 774 соединения. Каждой молекуле была присвоена интенсивность вкуса.

Распределение длин пептидов представлено на рисунке 1(а), больше всего пептидов состоят из трех аминокислот, чуть меньше пептидов из двух аминокислот. Частота встречаемости аминокислот представлена на рисунке 1(б). В базе данных самой часто встречающейся аминокислотой является глицин - 491 упоминание, пролин - 479 упоминаний, глутаминовая кислота находится - 405 упоминаний. Реже встречаются цистеин - 36 упоминаний и триптофан - 39 упоминаний.

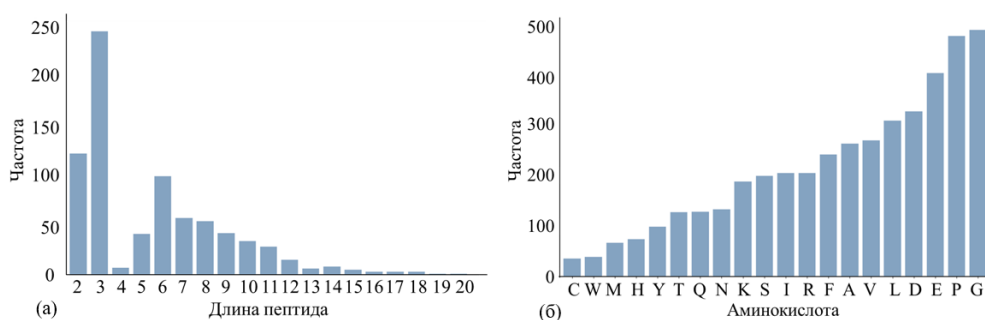


Рисунок 1 - Распределение длин пептидов в базе данных (а) распространённость аминокислот среди всех соединений (б)

Каждая строка в базе данных содержит молекулу - аминокислотную последовательность, энергию связывания с рецепторами T1R2a и T1R3 и их общую энергию, а также интенсивность вкуса. Связь между энергией связывания и интенсивностью вкуса довольно слабая, поскольку одной интенсивности может соответствовать несколько энергий связывания. Распределение не является гауссовым, поэтому задача не может быть решена простыми методами. В данной работе применяется несколько моделей, так как применение одной регрессионной модели для первичного анализа не эффективно. Поэтому для анализа был создан последовательный алгоритм, который состоит из двух алгоритмов. Схема разработанного алгоритма представлена на рисунке 3.

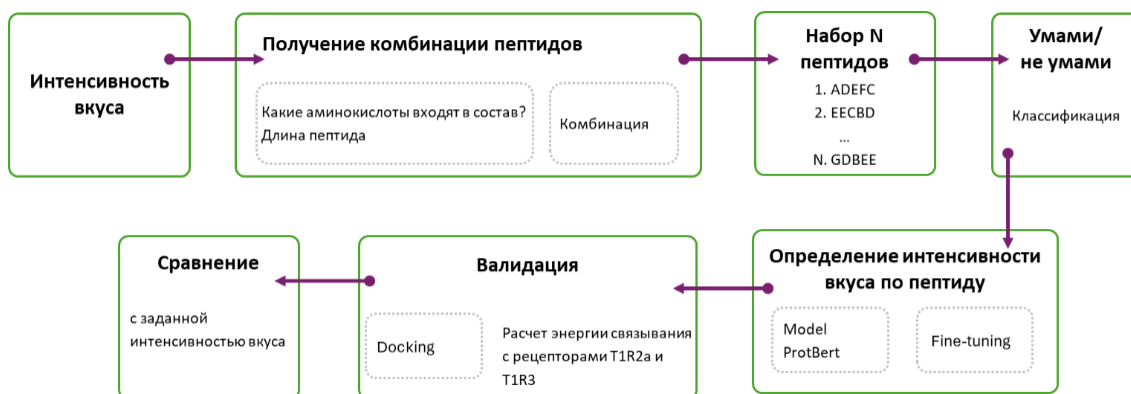


Рисунок 2 – Схема разработанного алгоритма

Первый алгоритм определяет аминокислоты, входящие в состав пептида. Второй алгоритм CatBoost предсказывает длину пептида. Далее происходит обработка с помощью языковой модели BERT, формируется набор с интенсивностью вкуса [2]. Затем данные сравниваются со значениями, заданными пользователем, и выдаются ближайшие значения. Общая архитектура работы алгоритма представлена на рисунке. На основе разработанного алгоритма, была построена тепловая карта, представленная на рисунке 3, для визуализации интенсивности вкуса дипептидов. Как видно, сочетания с глутаминовой аминокислотой, вносят свой вклад в формирование вкуса умами [3]. Из полученных данных видно, что "DA", "DD", "DE", "KG", "GF", "KH", "DG", "PY" также придают интенсивность вкуса умами, что подтверждают опубликованные ранее работы, это свидетельствует о корректности работы разработанного алгоритма.

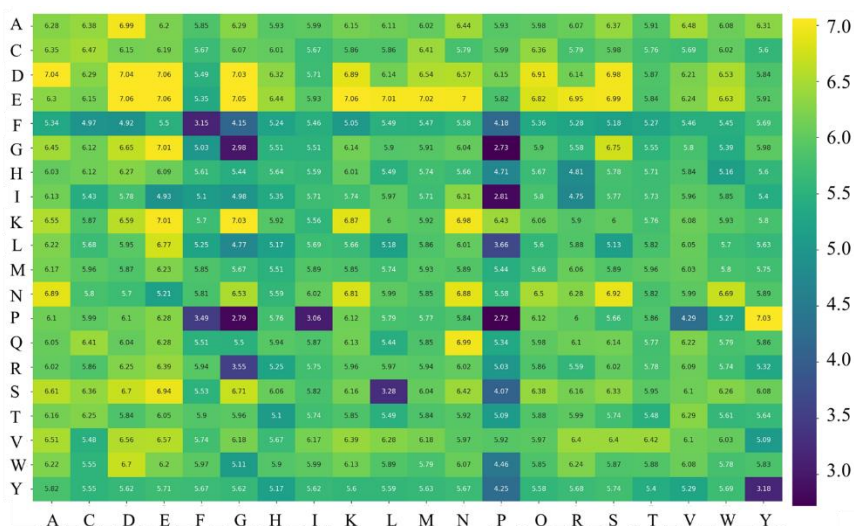


Рисунок 3 - Тепловая карта интенсивности вкуса дипептидов

Одним из пяти основных вкусов – вкус умами, он играет важную роль в пищевой индустрии. Чтобы улучшить качество продуктов и создать новые блюда, необходимо спрогнозировать интенсивность вкуса пептидов умами. Поэтому был разработан каскадный алгоритм, сочетающий в себе две мощные модели - CatBoost и BERT. Каскадный алгоритм позволяет достичь высокой точности предсказания интенсивности вкуса пептидов умами. Данный алгоритм является полезным инструментом для производства продуктов питания и исследователей, которые хотят улучшить качество продукции и создать новые модные блюда с уникальными вкусами. Было определено, что комбинации, усиливающие вкус умами, включают аспаргиновую кислоту и глутаминовую кислоту, лизин и глутаминовую кислоту и, в меньшей степени, комбинации пролина и тирозина. Представленные комбинации действуют, активируя специфические рецепторы языка, отвечающие за распознавание вкуса умами. В том числе некоторые комбинации аминокислот: сочетание аспаргиновой

кислоты с аланином или глицином может усилить вкус умами в продуктах питания. Аналогично, сочетание лизина с глицином или гистидином также может усилить вкус умами. В будущем планируется провести большую работу, охватывающую все оставшиеся вкусы, чтобы полностью обезопасить состав продуктов и облегчить создание здоровых вкусных блюд.

Библиографический список

1. Zhang J. et al. Peptidomics Screening and Molecular Docking with Umami Receptors T1R1/T1R3 of Novel Umami Peptides from Oyster (*Crassostrea gigas*) Hydrolysates // *J. Agric. Food Chem.* 2024. Vol. 72, № 1. P. 634–646.
2. Hancock J., Khoshgoftaar T. CatBoost for big data: an interdisciplinary review // *J. Big Data.* 2020. Vol. 7.
3. Wang S. et al. Investigation of Monosodium Glutamate Alternatives for Content of Umami Substances and Their Enhancement Effects in Chicken Soup Compared to Monosodium Glutamate // *J. Food Sci.* 2019. Vol. 84, № 11. P. 3275–3283.
4. Совершенствование процесса затирания при производстве пива / В. А. Помозова, А. Н. Потапов, У. С. Потитина, М. В. Просин // *Вестник КрасГАУ.* – 2012. – № 12(75). – С. 191-196
5. The use of Soxhlet extractor for the production of tinctures from plant raw materials / D. Borodulin, M. Prosin, I. Bakin [et al.] // *E3S Web of Conferences* : 13, Rostovon-Don, 26–28 февраля 2020 года. – Rostovon-Don, 2020. – P. 08010. – DOI 10.1051/e3sconf/202017508010
6. Патент № 2574681 С1 Российская Федерация, МПК А23L 1/212, А23L 2/385. Способ получения экстрактов из сушеного плодово-ягодного сырья : № 2014141857/13 : заявл. 16.10.2014 : опубл. 10.02.2016 / П. П. Иванов, Т. Ф. Киселева, А. С. Ушакова, В. Г. Ляховский ; заявитель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Кемеровский технологический институт пищевой промышленности"

RESEARCH ON OPTIMIZATION OF FUNCTIONAL FOOD ADDITIVES

Volodarsky Mikhail Olegovich, student at ITMO University, Faculty of Biotechnology, e-mail: michael.volodarsky@yandex.ru

Philozop Vladislav Sergeevich, student at ITMO University, Faculty of Biotechnology, e-mail: f1lozop@yandex.com

Osmak Olga Olegovna, engineer at ITMO University REC Infochemistry, e-mail: Osmak21@yandex.ru

Smirnov Igor Sergeevich, student at ITMO University, Faculty of Biotechnology, e-mail: is_smirnov@itmo.ru

Ashikhmina Maria Sergeevna, engineer of ITMO University REC Infochemistry, e-mail: msashikhmina@itmo.ru

Abstract: *The perception of products is a multisensory sensation that combines taste, smell, chemical irritation or tactile effects. Creating a database of flavoring additives makes the process of searching for new compounds fast and cheap. In silico tools based on legends and structures contribute to the creation of new tools for controlling the intensity of the taste of the molecule*

Keywords: *taste receptors, umami, machine learning, in silico, database.*

УДК 664.3.033

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ЛИНИИ ПРОИЗВОДСТВА МАЙОНЕЗА ПЕРИОДИЧЕСКИМ СПОСОБОМ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Демичев Владимир Васильевич, аспирант Технологического института, ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева», e-mail: demi4ev.volodymyr@yandex.ru

Назарова Анастасия Павловна, аспирант Технологического института, ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева», e-mail: nazarova.ap@rgau-msha.ru

Андреев Владимир Николаевич, канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры процессов и аппаратов перерабатывающих производств, ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева», e-mail: v.andreev@rgau-msha.ru

ФГБОУ ВО «Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева», Россия, Москва, e-mail: rector@rgau-msha.ru

Аннотация: с помощью программы для ЭВМ и модели черного ящика было выявлено узкое место линии производства майонеза периодическим способом. Для усовершенствования линии производства майонеза была разработана принципиально новая установка для гомогенизации грубой майонезной эмульсии.

Ключевые слова: майонез, сонохимическая обработка, программа для ЭВМ, черный ящик, системный анализ.

Майонез – продукт является эмульсией по типу «вода в масле». Содержание жировой фазы в майонезах начинается от 35%. Технология майонеза периодическим способом заключается в следующих основных этапах: образование горчичной пасты, то есть смесь горчичного порошка и воды в смесителе. Затем горчичная паста нагревается с помощью рубашки смесителя;