

DOI: <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2021-4-1-4-11>



<https://www.fsjour.com/jour>

Научная статья

# ОПТИМИЗАЦИЯ ПИЩЕВЫХ КОМПОЗИЦИЙ ПО ПРОФИЛЮ ИДЕАЛЬНОГО БЕЛКА

Зверев С. В.<sup>1\*</sup>, Карпов В. И.<sup>2</sup>, Никитина М. А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Всероссийский научно-исследовательский институт зерна и продуктов его переработки — филиал Федерального научного центра пищевых систем им. В. М. Горбатова РАН, Москва, Россия

<sup>2</sup> Московский государственный университет технологий и управления имени К. Г. Разумовского (Первый казачий университет), Москва, Россия

<sup>3</sup> Федеральный научный центр пищевых систем им. В. М. Горбатова Российской академии наук, Москва, Россия

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:

идеальный белок, аминокислоты, комбинаторная задача, критерий оптимизации, растительное сырье, структура белка

## АННОТАЦИЯ

В статье подчеркивается важность не только количественного, но и качественного состава белка в питании. Авторами предлагается классификация белка на три основные группы, согласно концепции эталонного (идеального) белка. Для решения задачи получения рациональной смеси при заданном профиле эталонного белка рассматривается математическая модель. Описаны два варианта критерия для формирования оптимальной композиции. Один из них, представляет из себя классическую сумму квадратов невязки скоров незаменимых аминокислот и единицы. Второй также сумму квадратов невязки скоров незаменимых аминокислот белка композиции и единицы, но с учетом только тех аминокислот, у которых скоры меньше единицы. В качестве целевых функций приняты минимумы этих критериев на множестве вариантов содержания ингредиентов. В программной среде Builder C++ 6.0 реализован алгоритм и программа вычисления. Представлена укрупненная блок-схема алгоритма и дано подробное описание каждого блока. Показан интерфейс программы до запуска расчетного модуля и после. Описаны основные окна и интерпретация представленных данных. Приведен пример реализации предлагаемого математического аппарата при составлении пищевой модельной композиции. В качестве объекта исследования были выбраны растительные компоненты (фасоль белая, лен, арахис, крупа «Полтавская», морковь красная сухая). Большинство растительных белков неполные. Комбинируя растительное сырье можно регулировать химический состав, в том числе корректировать профиль белка. Анализ альтернативных вариантов показал, что минимальный скор незаменимых аминокислот первой композиции равен 0.79 (по первому критерию), второй равен 1.0 (по второму критерию); доля эталонного белка в смеси 10.8 и 13.5, соответственно при первом и втором критерии. Даны сравнительные результаты и по другим показателям качества белка смеси: коэффициент различия аминокислотного состава (КРАС), биологическая ценность (БЦ), коэффициент утилитарности, индекс незаменимых аминокислот (ИНАК).

Available online at <https://www.fsjour.com/jour>

Original scientific article

# OPTIMIZATION OF FOOD COMPOSITIONS ACCORDING TO THE IDEAL PROTEIN PROFILE

Sergey V. Zverev<sup>1\*</sup>, Valeriy I. Karpov<sup>2</sup>, Marina A. Nikitina<sup>3</sup>

<sup>1</sup> All-Russian Scientific Research Institute for Grain and Products of its Processing — Branch of the V. M. Gorbatov Federal Research Center for Food Systems of RAS, Moscow, Russia

<sup>2</sup> K. G. Razumovsky Moscow State University of technology and management (First Cossack University), Moscow, Russia

<sup>3</sup> V.M. Gorbatov Federal Research Center for Food Systems of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

## KEY WORDS:

ideal protein, amino acids, combinatorial problem, optimization criterion, plant raw materials, protein structure ranking

## ABSTRACT

The paper emphasizes the importance of not only the quantitative but also qualitative composition of protein in nutrition. The authors propose protein classification into three main groups according to the concept of reference (ideal) protein. A mathematical model is examined to solve the task of rational mixture production upon the given profile of reference protein. Two variants of the criterion for formation of optimal composition are described. One of them presents the classical sum of squares of the residual for essential amino acid scores and 1. The second also presents the sum of squares of the residual for essential amino acid scores and 1 but with regard to only those amino acids, which scores are less than 1. The minima of these criteria at the set of variants for the content of ingredients are taken as targeted functions. The algorithm and the program of calculation were realized in the program environment Builder C++ 6.0. The macro flowchart of the algorithm is presented and detailed description of each block is given. The program interface before and after the start of the calculation module is shown. The main windows and interpretation of the presented data are described. An example of realization of the proposed mathematical apparatus when calculating a food model composition is given. Plant components (white kidney beans, flax, peanut, grit "Poltavskaya", dry red carrot) were used as an object of the research. Most plant proteins were incomplete. It is possible to regulate the chemical composition including correction of a protein profile by combination of plant raw materials. Analysis of alternative variants demonstrated that minimum essential amino acid score in the first composition was 0.79 (by the first criterion), in the second 1.0 (by the second criterion); the reference protein proportion in the mixture was 10.8 and 13.5, respectively, according to the first and second criterion. The comparative results by other quality indicators for protein in the mixture are also presented: the coefficient of amino acid score difference (CAASD), biological value (BV), coefficient of utility, essential amino acids index (IEAA).

ДЛЯ ЦИТИРОВАНИЯ: Зверев, С.В., Карпов, В.И., Никитина, М.А. (2021). Оптимизация пищевых композиций по профилю идеального белка. *Пищевые системы*, 4(1), 4–11. <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2021-4-1-4-11>

FOR CITATION: Zverev, S.V., Karpov, V.I., Nikitina, M.A. (2021). Optimization of food compositions according to the ideal protein profile. *Food systems*, 4(1), 4–11. <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2021-4-1-4-11>

## 1. Введение

В классической триаде «белки-жиры-углеводы» белки занимают особую роль, поскольку они, в частности, обеспечивают формирование и реставрацию мышечной массы человека, а, кроме того, несут ряд других жизненно необходимых функций. Как известно, 1) дефицит белка в организме приводит к нарушению его нормальной работы — потери памяти и ослаблению умственных возможностей, сопротивляемости организма; 2) избыток белка в организме приводит к перегрузке работы органов, в первую очередь это относится к функционированию печени и почек.

Рациональное использования белка организмом человека определяется двумя основными параметрами: его сбалансированностью по содержанию незаменимых аминокислот и отношению к белковому эталону, а также эффективностью обмена и утилизации белка системой пищеварения. В работе [1] рассматривается определение возможного «общего знаменателя» между потребностями в питании, математическими алгоритмами, которые могут быть применены к поставленной задаче, и экономическими аспектами, целевых функций при формулировании используемых математических моделей. Автором [2] предлагается оценивать качество белков в продуктах питания человека с помощью системы, называемой DIAAS (Digestible Indispensible Amino Acid Scores). Значения DIAAS были определены в 21 продукте, используемом в питании человека. Оценке качества моделей прогнозирования третичной структуры белка, в которых структуры наилучшего качества выбираются из нескольких моделей для определения полезности модели и ее потенциальных применений посвящена работа [3]. Количественной оценке качества пищевых белков на основе системы DIAAS посвящен обзор [4] в котором излагается обоснование включения многих факторов в расчет DIAAS и описываются связанные с ними потенциальные ошибки. Соавторы работы [5] разработаны комплекс методов для моделирования качества белков важной части прогнозирования их структуры. Ими использованы различные типы описания белка и различные методологии машинного обучения. Однако общим для всех этих методов была целевая функция, используемая для обучения. Целевая функция в ProQ описывает локальное качество остатка в белковой модели.

Как известно [6], в структуру многих белков входят не все аминокислоты. Так, например, белок кукурузы — зеин — не содержит таких аминокислот, как глицин, лизин, триптофан; в желатине нет аминокислот — тирозина, триптофана. Наиболее дефицитными считаются три аминокислоты — триптофан, лизин, метионин.

Триптофан играет важную роль в синтезе тканевых белков, в процессах обмена веществ и роста, участвует в образовании гемоглобина, сывороточных белков, никотиновой кислоты. При недостатке триптофана снижается синтез никотиновой кислоты и накапливается ксантуреновая кислота, которая угнетает  $\beta$ -клетки островков Лангерганса поджелудочной железы, провоцируя тем самым возникновения диабета [7].

Дефицит лизина, большое количество которого содержится в ядерных белках — протаминах и гистонах, вызывает задержку процессов биосинтеза белка.

Метионин является универсальным донатором метильных групп и таким образом участвует в синтезе холина, тимины, адреналина, креатинина. Стоит отметить, что креатинин играет важную роль в процессах, связанных с мышечным сокращением. Также метионин выступает источником серной кислоты, которая в активизированной форме обеспечивает обезвреживание в печени различных токсичных веществ [6].

Поэтому необходимо обеспечить их поступление в организм. Этого можно добиться лишь рациональным сочетанием ингредиентов в рецептурных смесях.

Ориентировочно человеку в сутки необходимо потреблять около одного грамма полноценного белка на каждый килограмм своего веса. Но именно полноценного белка. Если белок низкого качества, то все равно организм испытывает белковое голодание. Использование в рационе полноценного белка или сбалансированных растительных белковых смесей необходимо для исключения необратимых отклонений в здоровье человека.

Все белки — это соединенные в определенной последовательности цепочки из аминокислот [8]. Белки характерные для организма человека синтезируются самим организмом из аминокислот, поступивших с пищей. Под действием пищеварительных ферментов в организме происходит декомпозиция белка на аминокислоты (АК), всасывание аминокислот в кровь с последующим использованием на синтез новых белков, присущих данному организму.

Все аминокислоты можно разделить на две группы: незаменимые (не синтезируются в организме и поступают извне с пищей) и заменимые (могут синтезироваться в организме). Но часто выделяют ещё частично заменимые и условно незаменимые.

Аминокислоты усваиваются организмом в определенной пропорции. Отсюда следует концепция эталонного (идеального) белка. Таким образом, «идеальный» белок — условное понятие, обозначающее белок, по сбалансированности аминокислотного состава наиболее полно отвечающее потребностям организма человека. Профиль (аминокислотный состав) этого белка на основе многолетних медико-биологических исследований предлагается Продовольственной и сельскохозяйственной организацией (ФАО) при ООН. Периодически профиль эталонного белка пересматривается с учетом обновляемых научных знаний [9].

В 1989 г. совместная консультация экспертов ФАО/ВОЗ по оценке качества белка рекомендовала использовать метод аминокислотной шкалы с поправкой на усвояемость протеина (PDCAAS) для оценки качества белка [9].

В статье [10] представлен обзор использования метода PDCAAS по сравнению с другими методами, а также рекомендованные нормы потребления белка, используемые в настоящее время в разных странах в соответствии со стандартами WHO / FAO / UNU.

Исходя из концепции эталонного (идеального) белка, все белки можно разделить на три группы:

- Полноценный белок — аминокислотный (АК) профиль соответствует профилю эталонного белка;
- Неполноценный белок — хотя бы одна из незаменимых аминокислот (НАК) отсутствует;
- Неполный белок — все НАК присутствуют, но не в должной пропорции.

Животные белки полноценны и не нуждаются в дополнении. Как известно [11], большинство растительных белков неполные. Из двух неполных белков лучше и ценнее тот, у которого больше скор  $S_m$  первой лимитирующей НАК (с учетом усвояемости), т. е. больше эталонная часть белка. Очевидно, что в этом случае неполноценная (избыточная) часть белка  $(1 - S_m)$  однозначно меньше.

Профиль НАК растительных белков, как правило, может быть улучшен добавкой полноценного или комплементарного белка. Смешивая (комбинируя) те или иные продукты можно регулировать химический состав, в том числе корректировать профиль белка [11,12,13].

В последнее время отмечается повышенное внимание к эффективности использования белков вообще

и растительных в частности. Научные и практические основы производства пищевых продуктов с применением сырья растительного происхождения в России были заложены академиком А. Н. Несмеяновым [14]. В настоящее время, в Европейском Союзе с 1 января 2020 года, стартовал новый проект Smart Protein (<https://smartproteinproject.eu/>) для разработки следующего поколения экономичных, ресурсоэффективных и питательных продуктов. В рамках проекта стоимостью 10 миллионов евро исследуется потенциал альтернативных источников белка, которые можно использовать для создания ингредиентов и продуктов на растительной основе.

Целью представленной работы является разработка целевых функций, методики оптимизации (балансировки), алгоритма и программы расчета рациональной пищевой системы по критерию их соответствия эталонному белку.

## 2. Методология оптимизации

При выполнении работы осуществлялся сбор, анализ и интерпретация данных, количественная формулировка на основе научных принципов и эмпирических законов, оценка разработанных целевых функций, методики оптимизации, алгоритма и программ расчета по выбранным критериям.

### 2.1. Исходные данные для расчетов

В качестве исходных данных используются:

1) множество ингредиентов:

$$\text{Ingr}(i) = \langle \text{ingr}(i, j) \rangle, i = 1, N, j = 1, 9 \quad (1)$$

где  $\text{ingr}(i, 1)$  — содержание изолейцина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 2)$  — содержание лейцина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 3)$  — содержание лизина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 4)$  — содержание метионина+цистина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 5)$  — содержание фенилаланина+тирозина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 6)$  — содержание треонина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 7)$  — содержание триптофана в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 8)$  — содержание валина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 9)$  — содержание гистидина в  $i$ -й компоненте, %;  
 $\text{ingr}(i, 10)$  — содержание общего белка в  $i$ -й компоненте, %.

2) содержание НАК в эталонном (идеальном) белке  $\text{Idb}$ :

$$\text{Idb} = \langle \text{idb}(j) \rangle, j = 1, 9 \quad (2)$$

где  $\text{idb}(j)$  — содержание  $j$ -й аминокислоты в эталонном белке, %.

Требуется определить вектор  $X(k)$ , определяющий  $k$ -й вариант купажа:

$$X(k) = \langle x(k, i) \rangle, i = 1, N \quad (3)$$

где  $x(k, i)$  — доля  $i$ -го ингредиента в  $k$ -том варианте купажа, %; может принимать значения, равные 0, 1, 2, ... 100.

Расчет пропорций компонент смеси ведется методом сканирования. Для учета всех граничных точек, ограничения должны быть кратны шагу. Ниже, в модельном примере использован шаг 1%. Уменьшение шага сканирования при необходимости возможно, но при этом существенно возрастает время работы программы, а в результате получаем решение с точностью в сотых долях процента, что невозможно реализовать на практике.

Допустимое решение  $X(k)$  для любого варианта  $k$  определяется следующим условием

$$\forall k \sum_{i=1}^N x(k, i) = 100 \quad (4)$$

при этом состав белка  $kp(k, j)$  в купаже  $Kp(k)$  определяется по формуле:

$$Kp(k) = \langle kp(k, j) \rangle, j = 1, 9 \quad (5)$$

где  $kp(k, j)$  — содержание НАК в купаже  $k$ , %; вычисляется следующим образом:

$$kp(k, j) = \sum_{i=1}^N \text{ingr}(i, j) \times x(k, i) / 100 \times \text{ingr}(i, 10) / 100$$

Общее содержание белка  $kp(k, 10)$  в купаже  $k$ , %:

$$kp(k, 10) = \sum_{i=1}^N \text{ingr}(i, 10) \times x(k, i) / 100 \quad (6)$$

Структура содержания идеального белка в смеси относительно общего содержания белка в купаже  $k$  определяется вектором  $IKp(k)$ :

$$IKp(k) = \langle ikp(k, j) \rangle$$

где  $ikp(k, j) = kp(k, j) / kp(k, 10) \times 100$

Структура скоров в купаже  $k$  представляется вектором  $Skor(k)$ :

$$Skor(k) = \langle skor(k, j) \rangle, j = 1, 9 \quad (7)$$

где  $skor(k, j)$  — доля  $j$ -й НАК в купаже по отношению к эталонному, рассчитывается как

$$skor(k, j) = ikp(k, j) / \text{idb}(j)$$

### 2.2. Целевые функции оптимизации

Критерием качества белка композиции является ее минимальный скор НАК. В качестве критериев близости профиля белка композиции предлагаются следующие варианты:

1. В первом варианте при сравнении двух векторов участвуют все НАК [11]. Критерий имеет вид

$$K_1 = \sqrt{\sum_{j=1}^9 [1 - skor(k, j)]^2}, k = 1, K$$

2. Во втором варианте при сравнении двух векторов эталонного белка и белка композиции используются только те НАК, для которых скор меньше единицы. Критерий второго типа

$$K_2 = \sqrt{\sum_{j \in J} [1 - skor(k, j)]^2},$$

где  $J$  — множество всех  $j$ , для которых справедливо  $1 - skor(k, j) > 0$ .

В первом случае целевая функция имеет вид

$$F_1 = \min_k \sqrt{\sum_{j=1}^9 [1 - skor(k, j)]^2}, k = 1, K; \quad (8)$$

во втором

$$F_2 = \min_k \sqrt{\sum_{j \in J} [1 - skor(k, j)]^2}, \quad (9)$$

где  $J$  — множество всех  $j$ , для которых справедливо  $1 - skor(k, j) > 0$ .

Условием существования не тривиального (вырожденно-го) решения является наличие в смеси компонент с комплексными белками.

### 2.3. Алгоритм и программа расчета

Разработанный алгоритм и программа решения, реализованная на платформе Builder C++ 6.0. Алгоритм основан на генерации возможных вариантов с предварительным отсеком недопустимых и неперспективных вариантов. Допустимое решение ищется в пространстве натуральных чисел. Программа позволяет вносить ингредиенты моделируемой смеси, их диапазон варьирования, выбирать эталон ФАО/ВОЗ [15,16,17,18,19].

Укрупненно блок-схема алгоритма расчета приведена на Рисунке 1.

Алгоритм включает десять этапов, что обеспечивает решение поставленной задачи.

**Этап 1** является определяющим в формировании условий для математического обеспечения решения задачи.

Из базы данных выбираются ингредиенты будущей рецептуры и диапазон их варьирования, а также шкала-эталон идеального белка ФАО/ВОЗ.

На **этапе 2** задаются начальные значения критериев оптимизации  $F1_0$  (уравнение 8) и  $F2_0$  (уравнение 9). Переменной  $k$  (число итераций при решении задачи или номер допустимого варианта купажа) присваивается значение равное единице.

На **этапе 3** формируется (генерируется) первый купаж  $X(k)$  при  $k=1$ , т. е.  $X(1)$ , удовлетворяющий ограничениям (уравнение 3 и уравнение 4). Для первого купажа  $X(1)$  вычисляются критерии  $F1(1)$  (уравнение 8) и  $F2(1)$  (уравнение 9).

**Этап 4** связан с проверкой условия  $X(k)=0$ . Если условие выполняется, то мы переходим на завершающий этап 10. Происходит вывод оптимальной рецептуры смеси (композиции), а также значения оптимальных купажей и критериев  $F1$  (уравнение 8) и  $F2$  (уравнение 9), и число итераций, пройденное программой для получения оптимального решения.

Иначе происходит переход на этап 5.

**Этап 5** связан с проверкой условия текущего значения первого критерия  $F1(k)$  с начальным значением первого критерия  $F1_0$ . Если  $F1(k) < F1_0$  выполняется, происходит переход на этап 6, в противном случае на этап 7.

На **этапе 6** происходит перераспределение в значениях. В значение  $F1_0$  записывается (заносится) текущее значение  $F1(k)$ , а в значение  $X1_0$  вносится текущее значение  $X(k)$ .

**Этап 7** связан с проверкой условия текущего значения второго критерия  $F2(k)$  с начальным значением второго критерия  $F2_0$ . При выполнении условия  $F2(k) < F2_0$  происходит переход на этап 8, в противном случае на этап 9.

На **этапе 8** происходит перераспределение в значениях. В значение  $F2_0$  записывается (заносится) текущее значение  $F2(k)$ , а в значение  $X2_0$  вносится текущее значение  $X(k)$ .

На **этапе 9** выполняется переход на следующий уровень итерации ( $k=k+1$ ) и алгоритм возвращается к этапу 4.

На первом этапе решения задачи вводится информация о составе ингредиентов, показателей их качества, информация об эталонном белке, ограничения на использование ингредиентов. В случае безусловного присутствия той или иной компоненты в смеси диапазон ее варьирования при задании исходных данных сводится к нулю.

Алгоритм основан на генерации возможных вариантов с предварительным отсеком недопустимых и неперспективных вариантов.

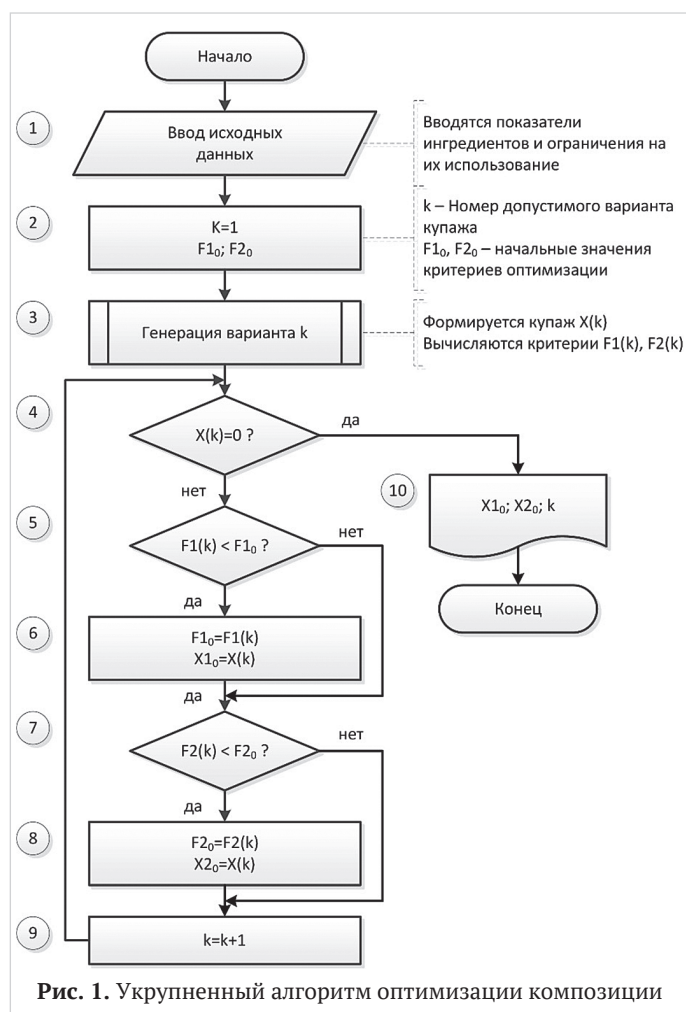


Рис. 1. Укрупненный алгоритм оптимизации композиции

Допустимое решение ищется в пространстве натуральных чисел. Программа (блок 1) позволяет вносить ингредиенты моделируемой смеси, их диапазон варьирования, выбирать эталон ФАО/ВОЗ [15,16,17,18,19]. Блок 3 формирует очередной вариант допустимого купажа, удовлетворяющий ограничениям (3), (4). Количество рассмотренных вариантов  $k$  выдается в отладочном окне, оптимальный вариант купажа для каждого критерия выдается на входной форме в строках «О смесь1», «О смесь2» (Рисунок 2).

|            | Изолейцин | Лейцин | Лизин | Метионин+Ц | Фениланин+Тир | Треонин | Триптофан | Валин | Гистидин |
|------------|-----------|--------|-------|------------|---------------|---------|-----------|-------|----------|
| Фасоль     | 4.9       | 8.29   | 7.57  | 2.05       | 8.38          | 4.14    | 1.24      | 5.33  | 2.72     |
| Лен        | 4         | 5.9    | 3.7   | 3.7        | 7.1           | 3.6     | 1.6       | 4.9   | 2.03     |
| Арахис     | 4.22      | 3.62   | 3.82  | 2.01       | 9.03          | 3.17    | 3.17      | 5.17  | 2        |
| Полтавская | 2.87      | 5.91   | 2.43  | 2.78       | 7.91          | 2.63    | 0.78      | 3.30  | 2.17     |
| Морковь    | 3.99      | 4.17   | 3.89  | 1.47       | 5.04          | 3.69    | 1.07      | 4.27  | 1.56     |
| Идеал_б    | 3         | 6.1    | 4.8   | 2.3        | 4.1           | 2.5     | 0.66      | 4.0   | 1.6      |
| О.смесь1   |           |        |       |            |               |         |           |       |          |
| О.смесь2   |           |        |       |            |               |         |           |       |          |

1. Исходные данные — ингредиенты будущей рецептурной смеси

2. Показатели качества ингредиентов и идеального белка

Ограничения на процент комп.

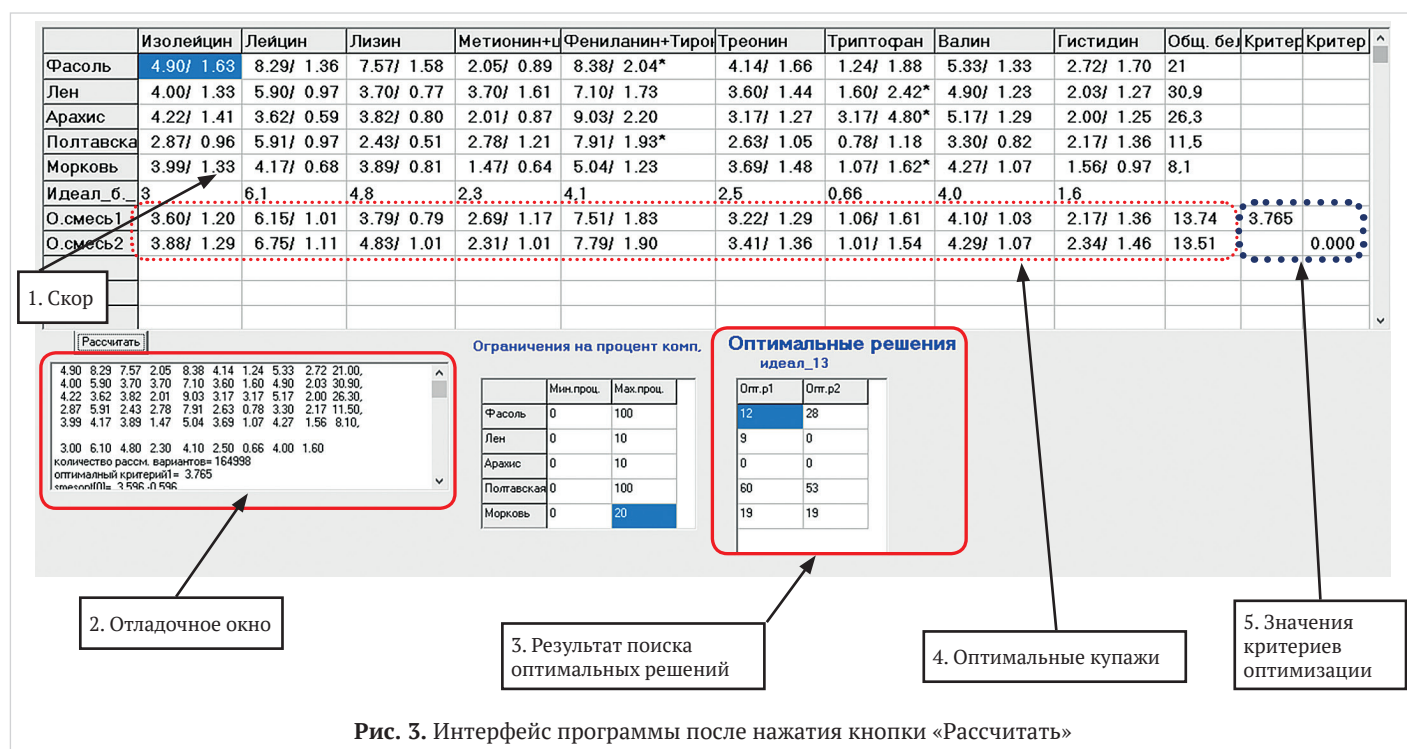
|            | Мин.проц. | Мак.проц. |
|------------|-----------|-----------|
| Фасоль     | 0         | 100       |
| Лен        | 0         | 10        |
| Арахис     | 0         | 10        |
| Полтавская | 0         | 100       |
| Морковь    | 0         | 20        |

3. Ограничения для ингредиентов

Оптимальные решения

| идеал_13 | Опт.р1 | Опт.р2 |
|----------|--------|--------|
|          |        |        |
|          |        |        |
|          |        |        |
|          |        |        |
|          |        |        |

Рис. 2. Интерфейс программы на этапе формирования исходных данных



В программе использован графический интерфейс платформы Builder C++ на основе объектов StringGrid, ListBox, Button, Label. Интерфейс на этапе ввода исходных данных представлен на Рисунке 2.

На первом этапе пользователь должен:

1. выбрать ингредиенты будущей рецептурной смеси (на рисунке выделено пунктирной линией);
2. выбрать эталонную шкалу ФАО/ВОЗ для идеального белка (в приведенном примере указан эталон ФАО/ВОЗ 2013 года);
3. установить диапазон варьирования (минимальное и максимальное значения), в котором может находиться ингредиент в рецептурной композиции (в представленном примере, диапазон варьирования фасоли белой от 0 до 100; льна — от 0 до 10; арахиса — от 0 до 10; крупы «Полтавская» — от 0 до 100; моркови красной (сухой) — от 0 до 20).

На втором этапе после нажатия пользователем кнопки «Рассчитать» получаем результат, представленный на Рисунке 3.

На экране пользователь видит следующие данные:

1. аминокислотный скор каждого ингредиента рецептурной смеси (через слэш после значения аминокислоты);
2. окно отладки. В нем представлено число итераций (в нашем примере  $k=164998$ ), сделанные программой до получения заданных значений критерия (в нашем случае, критерии стремятся к минимуму);
3. результат поиска оптимального решения по эталону ФАО/ВОЗ 2013 года (представлено в процентах содержание ингредиентов в рецептурной смеси по критерию 1 (уравнение 8) и по критерию 2 (уравнение 9));
4. оптимальные купажи (на рисунке выделены красной пунктирной линией);
5. значения критериев оптимизации (на рисунке выделены синей пунктирной линией).

### 3. Результаты и обсуждение

На примере расчета модельной композиции, состоящей из фасоли белой, льна, арахиса, крупы «Полтавская» и моркови красной покажем результаты работы программы с ис-

пользованием двух целевых функций оптимизации (уравнения 8, 9). Модельный рецептурный вариант композиции был выбран по следующим соображениям:

- 1) приемлемое вкусовое сочетание (в соответствии с кулинарными представлениями авторов);
- 2) заполнение всех пяти позиций, зарезервированных под компоненты. Расширение ассортимента компонент не представляет технической трудности;
- 3) сочетание комплементарных и не комплементарных компонент.

В Таблице 1 представлен профиль незаменимых аминокислот белка выбранных ингредиентов композиции и эталонного белка (ФАО/ВОЗ 2013 г.).

Таблица 1  
Аминокислотный состав, г/100 г белка [20, 21]

|                         | Лизин | Метионин + Цистин | Изолейцин | Лейцин | Треонин | Фенилаланин + Тирозин | Триптофан | Валин | Гистидин |
|-------------------------|-------|-------------------|-----------|--------|---------|-----------------------|-----------|-------|----------|
| Фасоль белая            | 7,57  | 2,05              | 4,90      | 8,29   | 4,14    | 8,38                  | 1,24      | 5,33  | 2,72     |
| Лен                     | 3,70  | 3,70              | 4,00      | 5,90   | 3,60    | 7,10                  | 1,60      | 4,90  | 2,03     |
| Арахис                  | 3,59  | 2,51              | 1,97      | 6,48   | 3,42    | 9,40                  | 0,97      | 4,19  | 2,53     |
| Крупа «Полтавская»      | 2,43  | 2,78              | 2,87      | 5,91   | 2,63    | 7,91                  | 0,78      | 3,30  | 2,17     |
| Морковь красная (сухая) | 3,89  | 1,47              | 3,99      | 4,17   | 3,69    | 5,04                  | 1,07      | 4,27  | 1,56     |
| Эталонный белок         | 4,8   | 2,3               | 3,0       | 6,1    | 2,5     | 4,1                   | 0,66      | 4,0   | 1,6      |

На основании приведенных данных в таблице 1 был рассчитан аминокислотный скор каждого ингредиента композиции по методике Х. Митчела и Р. Блока [22] по эталону 2013 года ФАО/ВОЗ. Данные расчета представлены в Таблице 2, лимитирующая аминокислота каждого ингредиента выделена зеленым цветом.

Таблица 2

|                         | Аминокислотный скор, % |                   |           |        |         |                       |           |       |          |
|-------------------------|------------------------|-------------------|-----------|--------|---------|-----------------------|-----------|-------|----------|
|                         | Лизин                  | Метионин + Цистин | Изолейцин | Лейцин | Треонин | Фенилаланин + Тирозин | Триптофан | Валин | Гистидин |
| Фасоль белая            | 1,58                   | 0,89              | 1,63      | 1,36   | 1,66    | 2,04                  | 1,88      | 1,33  | 1,70     |
| Лен                     | 0,77                   | 1,61              | 1,33      | 0,97   | 1,44    | 1,73                  | 2,42      | 1,23  | 2,31     |
| Арахис                  | 0,75                   | 1,09              | 0,66      | 1,06   | 1,37    | 2,29                  | 1,47      | 1,05  | 2,24     |
| Крупа «Полтавская»      | 0,51                   | 1,21              | 0,96      | 0,97   | 1,05    | 1,93                  | 1,18      | 0,83  | 1,52     |
| Морковь красная (сухая) | 0,81                   | 0,64              | 1,33      | 0,68   | 1,48    | 1,23                  | 1,63      | 1,07  | 0,97     |

Из Таблицы 2 видно, что основными лимитирующими НАК рассматриваемых ингредиентов являются лизин и серосодержащие аминокислоты «Метионин+Цистин». И только в арахисе таковой аминокислотой является изолейцин. Таким образом, условие наличия в композиции ингредиентов с комплементарными белками выполняется.

После выбора ингредиентов будущей рецептурной смеси, необходимо подобрать оптимальную рецептурную композицию для удовлетворения поставленным критериям и ограничениям. Для этого используем разработанный алгоритм. В результате работы программы по выбранным двум вариантам критериям оптимизации (эталонный белок от ФАО/ВОЗ 2013 г.) получили следующие данные (Таблица 3).

Таблица 3

| Результаты расчета модельной композиции |                |     |                                     |                                     |
|-----------------------------------------|----------------|-----|-------------------------------------|-------------------------------------|
| Продукт                                 | Ограничения, % |     | Доля продукта, %                    |                                     |
|                                         | min            | max | Критерий первого типа (уравнение 8) | Критерий второго типа (уравнение 9) |
| Фасоль                                  | 0              | 100 | 12                                  | 28                                  |
| Лен                                     | 0              | 10  | 9                                   | 0                                   |
| Арахис                                  | 0              | 10  | 0                                   | 0                                   |
| Крупа «Полтавская»                      | 0              | 100 | 60                                  | 53                                  |
| Морковь красная                         | 0              | 20  | 19                                  | 19                                  |
| <b>Смесь</b>                            |                |     |                                     |                                     |
| Скор лимитирующей НАК                   | —              | —   | Лизин 0,79                          | 1                                   |
| Доля эталонного белка, %                | —              | —   | 10,8                                | 13,5                                |
| <b>Значение критерия</b>                | —              |     | <b>3,77</b>                         | <b>0</b>                            |

В таблице 3 представлен интервал варьирования каждого компонента будущей смеси. В результате расчета для достижения экстремума по критерию первого типа (уравнение 8) из ингредиентов смеси был исключен — арахис; по критерию второго типа (уравнение 9) — лен и арахис. Если их присутствие в смеси по тем или иным соображениям

необходимо, то их долю в исходных данных необходимо задавать «жестко» (min = max). Из полученных данных видно, что второй критерий приводит к более приемлемым результатам: минимальный скор (1.0 против 0.79) и доля эталонного белка в смеси (13.5 против 10.8). При этом, значение критерия (9) для оптимального варианта предельно возможное (равно нулю).

Зная рецептуру смеси, мы также получаем дополнительные характеристики, связанные с качественными характеристиками белка (Таблица 4).

Таблица 4

| Качественные характеристики белка модельных рецептурных смесей |                                 |                                 |
|----------------------------------------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
|                                                                | Модельная рецептурная смесь № 1 | Модельная рецептурная смесь № 2 |
| Белок, %                                                       | 13,74                           | 13,51                           |
| Незаменимые аминокислоты, г/100 г белка                        |                                 |                                 |
| Лизин                                                          | 0,79                            | 1,01                            |
| Метионин+Цистин                                                | 1,17                            | 1,01                            |
| Изолейцин                                                      | 1,2                             | 1,29                            |
| Лейцин                                                         | 1,01                            | 1,11                            |
| Треонин                                                        | 1,29                            | 1,36                            |
| Фенилаланин+Тирозин                                            | 1,83                            | 1,09                            |
| Триптофан                                                      | 1,61                            | 1,54                            |
| Валин                                                          | 1,03                            | 1,07                            |
| Гистидин                                                       | 1,65                            | 1,54                            |
| Лимитирующая аминокислота (скор)                               | Лизин (0.79)                    | —                               |
| КРАС, %                                                        | 49,37                           | 46,58                           |
| БЦ, %                                                          | 50,63                           | 53,42                           |
| Коэффициент утилитарности, доли ед.                            | 0,41                            | 0,45                            |
| Индекс незаменимых аминокислот (ИНАК), доли ед.                | 0,45                            | 0,47                            |

#### 4. Выводы

Использование минимума наименьших квадратов невязки единицы и скоров лимитирующих НАК белка ингредиентов смеси в качестве критерия близости профиля НАК белка смеси к профилю эталонного белка приводит к положительным результатам при наличии в смеси компонент с комплементарными белками. Установлено, что критерий (9), учитывающий только положительные невязки, приводит к лучшим результатам.

Предлагаемая математическая модель и алгоритм решения позволяют в рамках принятых ограничений на содержание отдельных компонент получить рациональное их соотношение исходя из близости белка смеси эталонному белку, в соответствии с принятым критерием. В случае безусловного присутствия той или иной компоненты в смеси диапазон ее варьирования при задании исходных данных сводится к нулю.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- Burlacu, R. (2018). Mathematical model of optimization energy metabolism and protein quality to swine. *Scientific Papers. Series D. Animal Science*, LXI(1), 115–120.
- Stein, H. (2016). Evaluating protein quality of human foods using the pig as a model. *Journal of animal science*, 94(suppl\_2), 20–21. <https://doi.org/10.2527/msasas2016-045>
- Ouyang, J.Q., Huang, N.Q., Jiang, Y.Q. (2020). A single-model quality assessment method for poor quality protein structure. *BMC Bioinformatics*, 21(1), Article 157. <https://doi.org/10.1186/s12859-020-3499-5>
- Wolfe, R.R., Rutherfurd, S.M., Kim, I.-Y., Moughan, P.J. (2016). Protein quality as determined by the Digestible Indispensable Amino Acid Score: evaluation of factors underlying the calculation. *Nutrition reviews*, 74(9), 584–599. <https://doi.org/10.1093/nutrit/nuw022>
- Uziela, K., Menéndez Hurtado, D., Shu, N., Wallner, B., Elofsson, A. (2018). Improved protein model quality assessments by changing the target function. *Proteins-structure function and bioinformatics*, 86(6), 654–663. <https://doi.org/10.1002/prot.25492>
- Рогов, И.А., Антипова, Л.В., Дунченко, Н.И., Жеребцов, Н.А. (2000). Химия пищи. Кн. 1. Белки: структура, функции, роль в питании. — М.: Колос. — 384 с. ISBN 5–10–003538–2
- Нечаев, А.П., Траубенберг, С.Е., Кочеткова, А.А., Колпакова, В.В., Витол, И.С., Кобелева, И.Б. (2015). Пищевая химия. — СПб.: ГИОРД. — 672 с.
- Кочеткова, А.А. (2012). Пищевая химия. — М.: Гиорд. — 389 с.
- Dietary protein quality evaluation in human nutrition: Report of an FAO Expert Consultation. Rome: FAO, 2013. — 66 p.
- Boye, J., Wijesinha-Bettoni, R., Burlingame, B. (2012). Protein quality evaluation twenty years after the introduction of the protein digestibility corrected amino acid score method. *British Journal of Nutrition*, 108 (SUPPL. 2), S183–S211. <https://doi.org/10.1017/S0007114512002309>
- Зверев, С.В., Никитина, М.А. (2017). Оценка качества белка бобовых культур. *Комбикорма*, 4, 37–41.
- Zverev, S.V., Nikitina, M.A. (2019). Balance protein supplements on the criterion of convertible protein. *Food systems*, 2(1), 16–19. <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2019-2-1-16-19>
- Zverev, S., Sesikashvili, O., Pruidze, E. (2020). Enrichment of protein barley and triticale groats by adding chickpea. *Journal of Food and Nutrition Research*, 59(3), 202–206.
- Несмеянов, А.Н., Беликов, В.М. (1965). Проблема синтеза пищи. Доклад на пленарном заседании XI Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. М.: Наука. — 24 с.
- FAO (1970). Amino-Acid content of foods and biological data on proteins. FAO food and nutrition series. Rome, Italy. Retrieved from <http://www.fao.org/docrep/005/ac854t/ac854t00.htm>. Accessed November 09, 2020
- FAO/WHO (1973). Energy and protein requirements: Report of a joint FAO/WHO ad hoc expert committee. — Rome: FAO Nutrition Meetings Report Series No. 52. Geneva: WHO Technical Report Series No. 522.
- FAO/WHO-UNU. (1985). Energy and Protein Requirements: Report of a Joint FAO/WHO/UNU Expert Consultation, WHO Tech Report Series no.724, Geneva: WHO. ISBN 92–4–120724–8 Retrieved from <http://www.fao.org/docRep/003/aa040e/AA040E00.htm> Accessed November 09, 2020.
- FAO/WHO. (1991) Protein Quality Evaluation: Report of the Joint FAO/WHO Expert Consultation, FAO Food and Nutrition Paper 51. Rome, FAO. — 72 p. ISBN 92–5–103097–9
- FAO/WHO (2001). Report of the FAO/WHO Working Group on Analytical Issues Related to Food Composition and Protein Quality. Rome: FAO.
- Скурихин, М.И. (1987). Химический состав пищевых продуктов. Кн. 1. — М.: Агропромиздат. — 224 с.
- Свидетельство о регистрации базы данных RU2015620557. Пищевые продукты / Никитина М. А., Лисицын А. Б., Захаров А. Н., Сусь Е. Б., Пилюгина С. А., Дыдыкин А. С., Устинова А. В. Оpubл. 30.03.2015.
- Block, R.J., Mitchell, H.H. (1946). The Correlation of the Amino Acid Composition of Proteins with Their Nutritive Value. *Nutrition Abstracts & Reviews*, 16, 249–278.

## REFERENCES

- Burlacu, R. (2018). Mathematical model of optimization energy metabolism and protein quality to swine. *Scientific Papers. Series D. Animal Science*, LXI(1), 115–120.
- Stein, H. (2016). Evaluating protein quality of human foods using the pig as a model. *Journal of animal science*, 94(suppl\_2), 20–21. <https://doi.org/10.2527/msasas2016-045>
- Ouyang, J.Q., Huang, N.Q., Jiang, Y.Q. (2020). A single-model quality assessment method for poor quality protein structure. *BMC Bioinformatics*, 21(1), Article 157. <https://doi.org/10.1186/s12859-020-3499-5>
- Wolfe, R.R., Rutherfurd, S.M., Kim, I.-Y., Moughan, P.J. (2016). Protein quality as determined by the Digestible Indispensable Amino Acid Score: evaluation of factors underlying the calculation. *Nutrition reviews*, 74(9), 584–599. <https://doi.org/10.1093/nutrit/nuw022>
- Uziela, K., Menéndez Hurtado, D., Shu, N., Wallner, B., Elofsson, A. (2018). Improved protein model quality assessments by changing the target function. *Proteins-structure function and bioinformatics*, 86(6), 654–663. <https://doi.org/10.1002/prot.25492>
- Rogov, I.A., Antipova, L.V., Dunchenko, N.I., Zhrebetsov, N.A. (2000). Chemistry of the food. Book 1. Proteins: structure, functions, role in nutrition. Moscow: Kolos. 384 p. ISBN 5–10–003538–2
- Nechaev, A.P., Traubenberd, S.E., Kochetkova, A.A., Kolpakova, V.V., Vitol, I.S., Kobleleva, I.B. (2015). Food chemistry. Saint-Petersburg: GIORD. 672 p.
- Kochetkova, A.A. (2012). Food chemistry. Moscow: Giord. 389 p.
- Dietary protein quality evaluation in human nutrition: Report of an FAO Expert Consultation. Rome: FAO, 2013. — 66 p.
- Boye, J., Wijesinha-Bettoni, R., Burlingame, B. (2012). Protein quality evaluation twenty years after the introduction of the protein digestibility corrected amino acid score method. *British Journal of Nutrition*, 108(SUPPL. 2), S183–S211. <https://doi.org/10.1017/S0007114512002309>
- Zverev, S.V., Nikitina, M.A. (2017). Evaluation of the quality of leguminous protein. *Feed*, 4, 37–41.
- Zverev S. V., Nikitina M. A. (2019). Balance protein supplements on the criterion of convertible protein. *Food systems*, 2(1), 16–19. <https://doi.org/10.21323/2618-9771-2019-2-1-16-19>
- Zverev, S., Sesikashvili, O., & Pruidze, E. (2020). Enrichment of protein barley and triticale groats by adding chickpea. *Journal of Food and Nutrition Research*, 59(3), 202–206.
- Nesmeyanov, A.N., Belikov, V.M. (1965). The problem of food synthesis. Report at the plenary session of the XI Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry. Moscow: Nauka. 24 p.
- FAO (1970). Amino-Acid content of foods and biological data on proteins. FAO food and nutrition series. Rome, Italy. Retrieved from <http://www.fao.org/docrep/005/ac854t/ac854t00.htm>. Accessed January 09, 2019.
- FAO/WHO (1973). Energy and protein requirements: Report of a joint FAO/WHO ad hoc expert committee. — Rome: FAO Nutrition Meetings Report Series No. 52. Geneva: WHO Technical Report Series No. 522.
- FAO/WHO-UNU. (1985). Energy and Protein Requirements: Report of a Joint FAO/WHO/UNU Expert Consultation, WHO Tech Report Series no.724, Geneva: WHO. ISBN 92–4–120724–8 Retrieved from <http://www.fao.org/docRep/003/aa040e/AA040E00.htm> Accessed November 09, 2020.
- FAO/WHO. (1991) Protein Quality Evaluation: Report of the Joint FAO/WHO Expert Consultation, FAO Food and Nutrition Paper 51. Rome, FAO. — 72 p. ISBN 92–5–103097–9
- FAO/WHO (2001). Report of the FAO/WHO Working Group on Analytical Issues Related to Food Composition and Protein Quality. Rome: FAO.
- Skurikhin, M.I. (1987). Chemical composition of food products. Book 1. Moscow: Agropromizdat. 224 p.
- Nikitina M. A., Lisitsyn A. B., Zakharov A. N., Sus E. B., Pilugina S. A., Dydykin A. S., Ustinova A. V. Food product. Certificate of registration of the database RU, no. 2015620557, 2015.
- Block, R.J., Mitchell, H.H. (1946). The Correlation of the Amino Acid Composition of Proteins with Their Nutritive Value. *Nutrition Abstracts & Reviews*, 16, 249–278.

| СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | AUTHOR INFORMATION                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Принадлежность к организации                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | Affiliation                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <p><b>Зверев Сергей Васильевич</b> — доктор технических наук, профессор, заведующий лабораторией «Технология и техника производства зерновых культур», Всероссийский научно-исследовательский институт зерна и продуктов его переработки- Федерального научного центра пищевых систем им. В. М. Горбатова РАН<br/>127434, Москва, Дмитровское шоссе, 11<br/>Тел.: +7-903-533-38-43<br/>E-mail: zverevsv@yandex.ru<br/>ORCID: <a href="https://orcid.org/0000-0002-6136-1796">https://orcid.org/0000-0002-6136-1796</a><br/>* автор для контактов</p> | <p><b>Sergey V. Zverev</b> — doctor of technical sciences, professor, head of laboratory «Technology and technique of cereal production», All-Russian Scientific Research Institute of Grain and Products of Its Processing — Branch of V. M. Gorbatov Federal Research Center for Food Systems of RAS<br/>127434, Moscow, Dmitrovskoe shosse, 11<br/>Tel.: +7-903-533-38-43<br/>E-mail: zverevsv@yandex.ru<br/>ORCID: <a href="https://orcid.org/0000-0002-6136-1796">https://orcid.org/0000-0002-6136-1796</a><br/>* corresponding author</p> |
| <p><b>Карпов Валерий Иванович</b> — доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Информационные технологии и системы, Московский государственный университет технологий и управления имени К. Г. Разумовского (Первый казачий университет)<br/>109004, Москва, ул. Земляной Вал, 73<br/>Тел.: +7-916-583-34-93<br/>E-mail: vikarp@mail.ru<br/>ORCID: <a href="https://orcid.org/0000-0001-6338-0467">https://orcid.org/0000-0001-6338-0467</a></p>                                                                                         | <p><b>Valeriy I. Karpov</b> — doctor of technical Sciences, Professor, professor of the Department of «Information Technologies and Systems», K. G. Razumovsky Moscow State University of technology and management (First Cossack University), 109004, Moscow, Zemlyanoy Val str., 73.<br/>Tel.: +7-916-583-34-93<br/>E-mail: vikarp@mail.ru<br/>ORCID: <a href="https://orcid.org/0000-0001-6338-0467">https://orcid.org/0000-0001-6338-0467</a></p>                                                                                          |
| <p><b>Никитина Марина Александровна</b> — кандидат технических наук, доцент, ведущий научный сотрудник руководитель направления информационных технологий, Центр «Экономико-аналитических исследований и информационных технологий», Федеральный научный центр пищевых систем им. В. М. Горбатова РАН<br/>109316, г. Москва, ул. Талалихина, 26<br/>Тел.: +7-495-676-92-14<br/>E-mail: m.nikitina@fncps.ru<br/>ORCID: <a href="https://orcid.org/0000-0002-8313-4105">https://orcid.org/0000-0002-8313-4105</a></p>                                  | <p><b>Marina A. Nikitina</b> — candidate of technical sciences, docent, leading scientific worker, the Head of the Direction of Information Technologies, Center of Economic and Analytical Research and Information Technologies, V. M. Gorbatov Federal Research Center for Food Systems of Russian Academy of Sciences<br/>109316, Moscow, Talalikhina str., 26<br/>Tel.: +7-495-676-92-14<br/>E-mail: m.nikitina@fncps.ru<br/>ORCID: <a href="https://orcid.org/0000-0002-8313-4105">https://orcid.org/0000-0002-8313-4105</a></p>          |
| Критерии авторства                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Contribution                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| Авторы в равных долях имеют отношение к написанию рукописи и одинаково несут ответственность за плагиат                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Authors equally relevant to the writing of the manuscript, and equally responsible for plagiarism                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| Конфликт интересов                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Conflict of interest                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | The authors declare no conflict of interest                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Поступила 14.10.2020                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | Received 14.10.2020                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| Поступила после рецензирования 12.03.2021                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Accepted in revised 12.03.2021                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Принята в печать 25.03.2021                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Accepted for publication 25.03.2021                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |