

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Осипенко Сергея Владимировича

«Прогнозирование хромато-масс-спектрометрических характеристик химических соединений в нецелевом анализе с применением методов машинного обучения», представленной на соискание  
ученой степени кандидата химических наук  
по специальности 1.4.2 Аналитическая химия

Диссертационная работа Осипенко С.В. нацелена на решение задачи идентификации веществ в химическом анализе с использованием современных подходов из области искусственного интеллекта, что несомненно является актуальной научной проблемой. Для прогнозирования свойств молекул, определяемых в масс-спектрометрическом эксперименте применены передовые техники из области глубокого обучения, включая графовые нейронные сети, трансформеры и обучение с переносом, что свидетельствует о высоком уровне работы и обеспечивает научную новизну. Достигнутая в итоге точность предсказаний достаточно высока (в некоторых примерах среднее отклонение предсказанных значений от экспериментальных сопоставимо с отклонением при измерении величины в условиях внутрилабораторной воспроизводимости), и позволяет говорить о практической значимости результатов. Список публикаций по итогам работы свидетельствуют о высоком уровне проведенного исследования.

В качестве замечания можно отметить тот факт, что автором работы не описана последовательность предварительной подготовки молекулярных данных.

Несмотря на сделанное замечание, диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Осипенко Сергей Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2 Аналитическая химия.

Доктор химических наук, член-корреспондент РАН

Федоров Максим Валериевич

Адрес: 127051, г. Москва, Большой Каретный переулок, д.19 стр. 1.

e-mail:

Тел.:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской академии наук (ИППИ РАН), исполняющий обязанности директора.

Никонова Н.В.