

## 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 С.В. Осипенко относится к области хромато-масс-спектрометрического анализа низкомолекулярных соединений. Основная решаемая в работе задача связана с проблемой идентификации соединений в условиях отсутствия стандартных образцов, которая является весьма актуальной в метаболомных исследованиях. Выбранный автором подход по предсказанию удерживания и направлений фрагментации с использованием машинного обучения показывает хорошие результаты. Новыми являются модели прогнозирования удерживания, способ пересчета предсказаний на различные условия разделения и полученные экспериментально данные о селективности реакции изотопного обмена  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ . Практическую значимость могут иметь разработанные модели прогнозирования индексов удерживания и спектров электронной ионизации в ГХ-МС. Результаты исследований опубликованы в престижных журналах (*Journal of Chromatography A*, *The Analyst*, *Analytical and Bioanalytical Chemistry*).

К работе имеется ряд вопросов:

1. По временам удерживания и масс-спектрам электронной ионизации автор предлагает универсальные модели, однако для газохроматографических индексов удерживания такая модель автором не предложена, хотя обучающая выборка доступна. По какой причине?
2. Аналогично, прогнозирование ряда других характеристик, крайне важных для идентификации (сечение соударений в IMS, CID-фрагментация) в работе не рассмотрено.

Вышеуказанные вопросы и замечания не являются критическими, 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 биологических наук, профессор РАН

Згода Виктор Гаврилович

Адрес: 119121, Россия Москва, ул. Погодинская, д. 10, стр.8

e-mail: v

Тел. +7

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени В.Н. Ореховича», заведующий лабораторией системной биологии.

Подпись 

Ученый секретарь