Заключение диссертационного совета МГУ.014.5
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «9» сентября 2026 г. №6

О присуждении Хрисанфову Михаилу Дмитриевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «**Поиск ошибок в хроматографических базах данных и моделирование свойств идентифицируемых молекул методами машинного обучения**» по специальности 1.4.2. Аналитическая химия принята к защите диссертационным советом 10 июня 2026 г., протокол № 3.

Соискатель, Хрисанфов Михаил Дмитриевич, 1999 года рождения, в 2022 году окончил химический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», с 2022 г. по наст. вр. обучается в очной аспирантуре химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Соискатель работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории «умных» методов химического анализа, Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук (ИФХЭ РАН).

Диссертация выполнена на кафедре аналитической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель – кандидат химических наук **Самохин Андрей Сергеевич**, младший научный сотрудник кафедры аналитической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова; старший научный сотрудник научно-исследовательского института физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского, МГУ имени М.В. Ломоносова (по совместительству).

Официальные оппоненты:

Вирюс Эдуард Даниэлевич, доктор химических наук, Федеральный научный центр физической культуры и спорта, лаборатория биохимии, начальник лаборатории;

Кирсанов Дмитрий Олегович, доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, кафедра аналитической химии, профессор;

Канатьева Анастасия Юрьевна, кандидат химических наук, Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, лаборатория спектральных и хроматографических исследований, ведущий научный сотрудник.

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высокой компетентностью в области аналитической химии, в том числе в области хроматографии и хроматомасс-спектрометрии, методов хемометрики и хемоинформатики, а также наличием публикаций в соответствующей сфере по теме диссертации соискателя.

Соискатель имеет 9 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 4 работы, все - опубликованы в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук.

1. ***Khrisanfov M.****, Samokhin A.* A general procedure for rounding m/z values in low-resolution mass spectra // *Rapid Communications in Mass Spectrometry*. 2022. Vol. 36. № 11. e9294. EDN: PANTTY – 0.69 п.л. Вклад автора 60%. Импакт-фактор **2.0** (JIF).
2. ***Khrisanfov M. D.****, Matyushin D. D., Samokhin A. S.* A general procedure for finding potentially erroneous entries in the database of retention indices // *Analytica Chimica Acta*. 2024. Vol. 1297. 342375. EDN: OPAIVM – 0.81 п.л. Вклад автора 50%. Импакт-фактор **6.0** (JIF).
3. ***Khrisanfov M. D.****, Matyushin D. D., Samokhin A. S., Buryak A. K.* EI2FP: Efficient prediction of molecular fingerprints from electron ionization mass spectra // *Mass Spectrometry Letters*. 2024. Vol. 15. № 4. pp. 178-185. DOI: 10.5478/MSL.2024.15.4.178 – 0.92 п.л. Вклад автора 50%. Импакт-фактор **0.7** (JIF).
4. ***Khrisanfov M.****, Matyushin D., Samokhin A.* Finding potentially erroneous entries in METLIN SMRT // *Journal of Chromatography A*. 2025. Vol. 1745. 465761. EDN: IGUXUB – 0.69 п.л. Вклад автора 50%. Импакт-фактор **4.0** (JIF).

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной

работой, в которой на основании выполненных автором исследований приводятся сведения о практическом использовании новых научных выводов:

Предложен подход к поиску ошибочных записей в хроматографических базах данных NIST RI и METLIN SMRT с использованием объединения предсказаний нескольких независимых моделей машинного и глубокого обучения путем голосования. Показано с использованием синтетических наборов данных, что предложенный подход к поиску ошибок работает лучше более распространенных альтернатив, установлено влияние архитектуры и количества моделей на эффективность поиска ошибок, предложены способы оценки эффективности подхода к поиску ошибок и выбора оптимального значения его параметров для неразмеченных наборов данных. Разработанное решение распространяется в виде библиотеки для языка программирования Python с открытым исходным кодом вместе с пошаговой инструкцией. Применение подхода к фильтрованию позволило найти 2093 потенциально ошибочные записи в базе данных NIST 17 RI и 1544 в METLIN SMRT.

Предложен алгоритм округления значений m/z масс-спектров низкого разрешения ($\Delta m_{50\%} \sim 0.5$) с плавающей запятой до целочисленных, позволяющий минимизировать влияние случайных приборных погрешностей на результаты. Подход добавлен разработчиками в широко применяемый для обработки хроматомасс-спектральных данных пакет OpenChrom.

Усовершенствованы архитектуры нейросетевых моделей и способы распространения подходов к предсказанию масс-спектров электронной ионизации по структуре молекулы и молекулярных отпечатков пальцев по масс-спектрам электронной ионизации. Предложенные подходы с увеличенной точностью предсказания масс-спектров электронной ионизации по структуре молекулы и с возросшей скоростью обучения и предсказания молекулярных отпечатков пальцев по масс-спектрам электронной ионизации распространяются в открытом доступе, что позволяет использовать их в практических и исследовательских задачах сторонними группами.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Подход, основанный на объединении предсказаний нескольких независимых моделей машинного и глубокого обучения путем голосования, позволяет эффективно обнаруживать ошибки в хроматографических базах данных NIST RI

и METLIN SMRT, а также оценивать точность обнаружения на неразмеченных наборах данных.

2. Алгоритм округления значений m/z с плавающей запятой в масс-спектрах низкого разрешения ($\Delta m_{50\%} \sim 0.5$) до целочисленных позволяет уменьшить зависимость результатов от случайных приборных ошибок.
3. Оптимизированные архитектуры и гиперпараметры нейросетевых моделей позволяют увеличить точность предсказания масс-спектров электронной ионизации по структуре молекулы, а также ускорить обучение и улучшить правильность, точность и полноту предсказания молекулярных отпечатков по масс-спектрам электронной ионизации.

На заседании **9 сентября 2026 года** диссертационный совет принял решение присудить **Хрисанфову М.Д.** ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 15 докторов наук, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за - 16, против - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель диссертационного совета
д.х.н., доц., проф. РАН Проскурнин М.А.

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.х.н. Ананьева И.А.

10.09.2026