

Заключение диссертационного совета МГУ.02.05

по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «17» апреля 2019 г. № 5

О присуждении **Назаренко Дмитрию Владимировичу**, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация **«Химический анализ для идентификации лекарственных растений: хромато-масс-спектрометрия с интерпретацией данных методами машинного обучения»** по специальности **02.00.02 – Аналитическая химия** принята к защите диссертационным советом 6 марта 2019 г., протокол № 2.

Соискатель, Назаренко Дмитрий Владимирович, 1991 года рождения, в 2018 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Соискатель работает старшим аналитиком в ООО «Аксенчер».

Диссертация выполнена на кафедре аналитической химии в лаборатории хроматографии химического факультета МГУ.

Научный руководитель – доктор химических наук **Родин Игорь Александрович**, ведущий научный сотрудник химического факультета МГУ.

Официальные оппоненты:

Родионова Оксана Евгеньевна, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии наук,

Дворкин Владимир Ильич, доктор химических наук, главный научный сотрудник, Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева

Российской академии наук,

Каламбет Юрий Анатольевич, кандидат физико-математических наук,
ООО «Амперсенд»,

дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Соискатель имеет **3** опубликованные работы, в том числе по теме диссертации **3** работы, из них **3** статей, опубликованные, в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности.

1. Nazarenko D.V., Kharyuk P.V., Oseledets I.V., Rodin I.A., Shpigun O.A., A.N. Tsitsilin, M.V. Lavrentyev. Employing fingerprinting of medicinal plants by means of LC-MS and machine learning for species identification task. // *Scientific Reports*, 2018. Vol. 8, <https://doi.org/10.1038/s41598-018-35399-z>. (Импакт-фактор 2017 4.122).
2. Nazarenko D.V., Kharyuk P.V., Oseledets I.V., Rodin I.A., Shpigun O.A. Machine learning for LC-MS medicinal plants identification. // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2016. Vol. 156, P. 174-180. (Импакт - фактор 2017 2.701).
3. Назаренко Д.В., Родин И.А., Шпигун О.А. Применение машинного обучения в аналитическом контроле препаратов лекарственных растений. // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*, 2018. Т. 84, № 10, С. 67 - 78. (Импакт-фактор РИНЦ 2017 0.364).

На диссертацию и автореферат поступили 5 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высокой компетенцией в области аналитической химии, различных методов спектрального и хроматографического анализа, а также наличием публикаций в соответствующей сфере по теме диссертации соискателя

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация

на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований содержится решение задач, имеющих значение для развития аналитической химии:

Изучены особенности извлечения характеристических химических профилей при ВЭЖХ-МС анализе лекарственных растений.

Показано влияние подходов к предобработке и преобразованию данных химических профилей на эффективность работы идентификационных алгоритмов.

Разработаны подходы к идентификации видовой принадлежности препаратов лекарственных растений на основе ВЭЖХ-МС анализа и машинного обучения.

Исследована устойчивость разработанного подхода к влиянию возмущений в химических данных, вызванных различными изменениями в способе анализа экстрактов, на эффективность работы идентификационных алгоритмов.

Показан вклад соединений с различными молекулярными массами в эффективность идентификационных алгоритмов.

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. Подходы к предобработке данных химических профилей лекарственных растений, полученных на основе ВЭЖХ-МС анализа экстрактов.

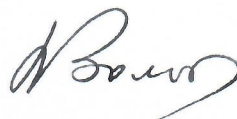
2. Подход к идентификации видовой принадлежности неизвестных растительных образцов в порошковой форме на основе ВЭЖХ-МС анализа и методов машинного обучения.

3. Результаты апробации предложенного подхода на образцах 74 видов лекарственных растений.

На заседании **17 апреля 2019 г.** диссертационный совет принял решение присудить **Назаренко Д.В.** ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 13 докторов наук, участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 14, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель
диссертационного совета МГУ.02.05.
д.х.н., профессор академик РАН



Золотов Ю.А.

Ученый секретарь
диссертационного совета МГУ.02.05.
к.х.н., с.н.с



Ананьева И.А.

18.04.2019 г.