



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Development of a Catalyst Informatics Pipeline for Heterogeneous Catalyst Design [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	Garcia Escobar, Fernando
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第16364号
Issue Date	2025-03-25
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/94957
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	Garcia_Escobar_review.pdf, 審査の要旨



学 位 論 文 審 査 の 要 旨

博士の専攻分野の名称 博士（理学） 氏名 GARCIA ESCOBAR Fernando

審査担当者	主査	教授	前田 理
	副査	教授	高橋 啓介
	副査	教授	清水 研一
	副査	教授	小松崎 民樹

学 位 論 文 題 名

Development of a Catalyst Informatics Pipeline for Heterogeneous Catalyst Design
(不均一系触媒設計のための触媒インフォマティクス・パイプラインの開発)

触媒インフォマティクスは触媒データから機械学習等のデータ科学技術を活用した第四の科学と呼ばれる新しい分野である。しかし、触媒活性を記述する説明変数が決定されておらず、機械学習による触媒開発は依然困難を極めている。

本学位論文では触媒の説明変数を探索し機械学習を触媒開発を適用できるようにした革新的な研究である。本論文では MonteCat 法という独自のアルゴリズムを開発し、数千からなる触媒の説明変数を周期表の物理量から自動で生成し、自動で最適な説明変数を選択できる方法論を確立した。本論文ではメタン酸化カップリング反応に MonteCat 法を適用し、機械学習と MonteCat 法によって選ばれた説明変数により触媒の開発を行い、実験による新規固体触媒の開発を達成している。これを要するに、著者は機械学習による触媒開発の設計方法を明確に確立したものであり、触媒開発に大きく貢献した。

よって著者は、北海道大学博士（理学）の学位を授与される資格あるものと認める。