

2025 年 7 月 31 日
株式会社 近代科学社

<https://www.kindaikagaku.co.jp/>

『ベイズ最適化』が更に理解しやすく、実践できる内容に更新！
**『増補改訂版 ベイズ最適化
—適応的実験計画の基礎と実践—』
発行**

インプレスグループで理工学分野の専門書出版事業を手掛ける株式会社近代科学社は、2025 年 7 月 31 日に、『増補改訂版 ベイズ最適化 —適応的実験計画の基礎と実践—』(著者 今村 秀明・松井 孝太)を発行いたしました。



近代科学社

●書誌情報

【書名】増補改訂版 ベイズ最適化 —適応的実験計画の基礎と実践—

【著者】今村 秀明・松井 孝太

【仕様】A5 判・並製・368 頁

【本体価格】4,300 円(税込 4,730 円)

【ISBN】978-4-7649-0756-0 C3004

【商品 URL】https://www.kindaikagaku.co.jp/book_list/detail/9784764907560/

●内容紹介

本書ではベイズ最適化の理論・アルゴリズムを基礎から応用まで詳細に説明し、ブラックボックス最適化ソフトウェア「Optuna」の利用方法も紹介しています。増補改訂版では、Optuna のバージョンアップに合わせて第 4 章を全面的に修正・加筆。ベイズ最適化の実践・開発をサポートしています。また第 5 章では「リグレッション解析」と呼ばれる理論を新たに取り上げました。ベイズ最適化を学ぶための基礎体力が身につけられるよう、理論と実践の両面を更に充実させています。

●著者紹介

今村 秀明 (いまむら ひであき)

2018 年 東京大学理学部情報科学科卒

2020 年 東京大学大学院情報理工学系研究科コンピュータ科学専攻修士号

2020 年 4 月から株式会社 Preferred Networks リサーチャー。

学生時代はベイズ最適化の理論などを研究。

現在は同 AutoML チームにてブラックボックス最適化ソフトウェア Optuna の開発および汎用原子レベルシミュレータ Matlantis を利用したブラックボックス最適化の応用研究開発に従事。

著書に「Optuna によるブラックボックス最適化」

松井 孝太 (まつい こうた)

2014 年 名古屋大学大学院情報科学研究科計算機数理科学専攻博士課程

後期課程単位取得退学

2017 年 博士 (情報科学)

2025 年 4 月から京都大学大学院医学研究科社会健康医学系専攻医療統計学分野准教授.

同 5 月から滋賀大学データサイエンス・AI イノベーション研究推進センター 特任准教授 (兼任). 専門は統計的機械学習, 生物統計学. 特に医学や材料科学などのスモールデータな領域のための, 転移学習や適応的実験計画の手法を用いたデータ解析手法の研究開発に従事.

●目次

改訂にあたって

はじめに

第 1 章 機械学習による適応的実験計画とベイズ最適化

- 1.1 データ駆動型実験科学とベイズ最適化
- 1.2 ブラックボックス最適化とハイパーパラメータ最適化
- 1.3 ベイズ最適化

第 2 章 ブラックボックス関数のベイズモデリング

- 2.1 ベイズ線形回帰モデル
- 2.2 ガウス過程回帰モデル

第 3 章 ベイズ最適化のアルゴリズム

- 3.1 はじめに
- 3.2 改善確率量獲得関数
- 3.3 期待改善量獲得関数
- 3.4 信頼下限獲得関数
- 3.5 トンプソン抽出獲得関数
- 3.6 エントロピー探索獲得関数
- 3.7 エントロピー探索獲得関数 予測
- 3.8 ベイズ最適化の終了条件
- 3.9 出力の生成方法
- 3.10 ハイパーパラメータの取り扱い

第 4 章 Optuna によるベイズ最適化の実装方法

- 4.1 Optuna とは
- 4.2 Optuna の基礎的な使い方
- 4.3 Optuna におけるベイズ最適化
- 4.4 GPSampler の基礎的な使い方
- 4.5 GPSampler の発展的な使い方
- 4.6 Optuna の発展的な使い方
- 4.7 OptunaHub の利用

第5章 ベイズ最適化の理論

- 5.1 アルゴリズムの性能評価に対する二つのアプローチ
- 5.2 ベイズ最適化アルゴリズムの評価指標: リグレットの定義
- 5.3 リグレット性の証明のための準備
- 5.4 信頼上限アルゴリズムのリグレット解析

第6章 制約付きベイズ最適化

- 6.1 制約付き最適化とは
- 6.2 制約付き最適化の問題設定
- 6.3 制約を考慮した目的関数のモデリング
- 6.4 制約付き期待改善量
- 6.5 制約付き予測エントロピー探索

第7章 多目的ベイズ最適化

- 7.1 多目的最適化とは
- 7.2 多目的最適化の問題設定
- 7.3 多目的最適化における目的関数のモデリング
- 7.4 期待超体積改善量

第8章 高次元空間でのベイズ最適化

- 8.1 高次元空間上でのベイズ最適化の課題
- 8.2 目的関数の加法的分解に基づく方法
- 8.3 入力空間の次元削減に基づく方法
- 8.4 局所的なモデリングに基づく方法

第9章 並列ベイズ最適化

- 9.1 並列最適化とは
- 9.2 並列最適化における問題点
- 9.3 嘘つき法
- 9.4 局所ペナルティ法
- 9.5 モンテカルロ獲得関数

付録

- A.1 数値最適化と勾配法の基礎
- A.2 ブラックボックス最適化のための種々の方法

参考文献

索引

【株式会社 近代科学社】 <https://www.kindakagaku.co.jp>

株式会社近代科学社(本社:東京都千代田区、代表取締役社長:大塚浩昭)は、1959年創立。

数学・数理学・情報科学・情報工学を基軸とする学術専門書や、理工学系の大学向け教科書等、理工学専門分野を広くカバーする出版事業を展開しています。自然科学の基礎的な知識に留まらず、その高度な活用が要求される現代

のニーズに応えるべく、古典から最新の学際分野まで幅広く扱っています。また、主要学会・協会や著名研究機関と連携し、世界標準となる学問レベルを追求しています。

【インプレスグループ】 <https://www.impressholdings.com>

株式会社インプレスホールディングス（本社：東京都千代田区、代表取締役：松本大輔）を持株会社とするメディアグループ。

「IT」「音楽」「デザイン」「山岳・自然」「航空・鉄道」「モバイルサービス」「学術・理工学」を主要テーマに専門性の高いメディア&サービスおよびソリューション事業を展開しています。さらに、コンテンツビジネスのプラットフォーム開発・運営も手がけています。

【お問い合わせ先】

株式会社近代科学社

TEL：03-6837-4828

電子メール: reader@kindaikagaku.co.jp