Beim maschinellen Lernen ist die Hyperparameter-Optimierung das Problem der Auswahl eines Satzes von optimalen Hyperparametern für ein neuronales Netz und den daraus folgenden Lernalgorithmus. Die Hyperparameter-Optimierung versucht ein Tupel von Hyperparametern, das ein optimales neuronales netz ergibt, das eine vordefinierte Verlustfunktion bei gegebenen Daten minimiert. Die bekanntesten Ansätze der Hyperparameter optimierung sind: die Gittersuche, die einfach eine erschöpfende Suche durch eine manuell festgelegte Teilmenge des Raums der betreffenden Hyperparameter ist. Ein Gittersuchalgorithmus muss sich an einer Leistungsmetrik orientieren, die in der Regel durch Kreuzvalidierung der Trainingsmenge gemessen wird. Die Zufallssuche, die die erschöpfende Aufzählung aller Kombinationen durch eine zufällige Auswahl ersetzt. Sie kann die Gittersuche übertreffen, insbesondere wenn nur eine kleine Anzahl von Hyperparametern die endgültige Leistung des Algorithmus für maschinelles Lernen beeinflusst. Und noch der Ansatz der Bayes'schen Optimierung, bei der ein probabilistisches Modell der Funktion erstellt wird, die die Werte der Hyperparameter auf das Ziel abbildet, das anhand einer Validierungsmenge bewertet wird. Durch die iterative Bewertung einer vielversprechenden Hyperparameterkonfiguration auf der Grundlage des aktuellen Modells und die anschließende Aktualisierung dieses Modells zielt die Bayes'sche Optimierung darauf ab, Beobachtungen zu sammeln, die so viele Informationen wie möglich über diese Funktion und insbesondere über die Lage des Optimums liefern. In der Praxis hat sich gezeigt, dass die Bayes'sche Optimierung im Vergleich zur Gittersuche und zur zufälligen Suche bessere Ergebnisse bei weniger Auswertungen erzielt, da sie in der Lage ist, Rückschlüsse auf die Qualität der Experimente zu ziehen, bevor diese durchgeführt werden.