

Popular summary in English

Trial and error is a fundamental approach to problem-solving, evident in both everyday life and industrial settings. When faced with an unknown, we often begin by experimenting with different options, observing what works best, and gradually refining our choices. For example, a chef might adjust the ingredients in a recipe based on taste, or an engineer may test various parameters of a machine to optimize its performance. Over time, this process becomes more informed as we internalize what each adjustment achieves, allowing us to make smarter choices with each iteration.

In industrial contexts, trial and error is particularly valuable but comes at a high cost. Adjusting manufacturing parameters, for example, can improve product quality, yet each test may consume significant time, materials, and labor. Unlike a personal or small-scale trial-and-error process, the adjustments required in an industrial setting are often too complex to intuitively internalize, making it difficult to predict which changes will yield the best results. Thus, effective trial and error in these contexts requires a systematic approach that learns from each past attempt to guide future decisions, focusing resources on promising adjustments while steering clear of less productive options. The ultimate goal is to automate this learning process - to internalize it, algorithmically.

Bayesian Optimization (BO) is designed to tackle these challenges by finding optimal solutions with minimal trials, using past observations to help inform where to explore next. BO relies on a surrogate model that learns from prior evaluations to estimate the most promising areas for subsequent testing, enabling a systematic and efficient search for the best solution, whether in optimizing a recipe or fine-tuning an industrial process.

However, traditional BO methods have limitations in that they primarily learn from observed data while often overlooking insights from experts or other sources of information. Practitioners frequently bring valuable knowledge to the process, such as experience-based insights into likely successful parameter ranges or system behaviors. Despite this, conventional BO frameworks are typically unable to incorporate such prior knowledge, instead assuming that each scenario lacks meaningful initial understanding of the objective function landscape. This thesis addresses this limitation by developing methods that directly integrate practitioner beliefs, prior information, and foundational assumptions into the BO framework, thereby enhancing both its efficiency and effectiveness.

Populärvetenskaplig Sammanfattning på Svenska

Att empiriskt testa sig fram (eng. "trial-and-error") är en grundläggande metod för problemlösning, som uppkommer både i vardagen och i industriella sammanhang. När vi ställs inför ett okänt problem börjar vi ofta med att experimentera med olika alternativ, observerar vad som fungerar bäst och förfinar gradvis våra val därefter. Exempelvis kan en kock justera ingredienserna i ett recept utifrån önskad smak, eller en ingenjör kan testa olika inställningar på en maskin för att optimera dess prestanda. Med tiden blir båda dessa processer mer informerade allt eftersom vi internaliserar vad varje justering åstadkommer, vilket gör att vi kan fatta smartare beslut med varje nytt test.

I industriella sammanhang är trial-and-error särskilt relevant, men förknippat med höga kostnader. Att justera parametrar i en tillverkningsprocess kan förbättra produktens kvalitet, men kan kräva betydande resurser i form av tid, material och arbetskraft. Dessutom är de justeringar som krävs i industrin ofta för komplexa för att internaliseras, vilket gör det svårt att intuitivt och pålitligt prediktera vilka förändringar som ger bäst resultat. Effektiv trial-and-error i dessa sammanhang kräver därför en systematisk metod som lär av tidigare försök - som styr framtida beslut med hjälp av en begränsad mängd historisk data. Resurser bör fokuseras på lovande konfigurationer medan mindre produktiva alternativ undviks, med det övergripande målet att automatisera inlärningsprocessen

Bayesiansk optimering (BO) är ett verktyg för att hantera dessa utmaning - att hitta högpresterande lösningar med minimalt antal försök. Genom att använda tidigare data informerar BO beslut om hur framtida tester ska ske. BO bygger på en modell som emulerar målfunktionen och lär sig från tidigare data för att uppskatta de mest lovande områdena för kommande tester. Detta möjliggör en systematisk och effektiv sökning efter högkvalitativa lösningar, oavsett om målfunktionen är att optimera ett recept eller kalibrera en industriell process.

Dock har traditionella metoder inom BO begränsningar. Eftersom de främst lär sig av observerade data, förbiser de insikter från andra informationskällor. Utövare och ämnesexperter bidrar ofta med värdefull kunskap till processen, såsom erfarenhetsbaserade insikter om högpresterande testparametrar eller systembeteenden. Trots detta saknar konventionella BO-ramverk förmågan att integrera sådan förkunskap, och antar istället att man i varje ny situation saknar en meningsfull initial förståelse av målfunktionens utformning och beteende. Denna avhandling adresserar denna begränsning genom att utveckla metoder som direkt integrerar användares förståelse, tidigare information och antaganden i BO-ramverket, vilket förbättrar både dess effektivitet och funktionalitet.