



Transparente Zeitreihenprognosen

Explainable AI (XAI) für Business-User bei der BASF



Dr. Markward Britsch
Senior Data Scientist
HMS Analytical Software GmbH



Stephan Sauer
Head of Forecast Solutions
BASF Digital Solutions GmbH

data2day 19.09.2024

01

Vorstellung BASF und FCP

BASF – We create chemistry

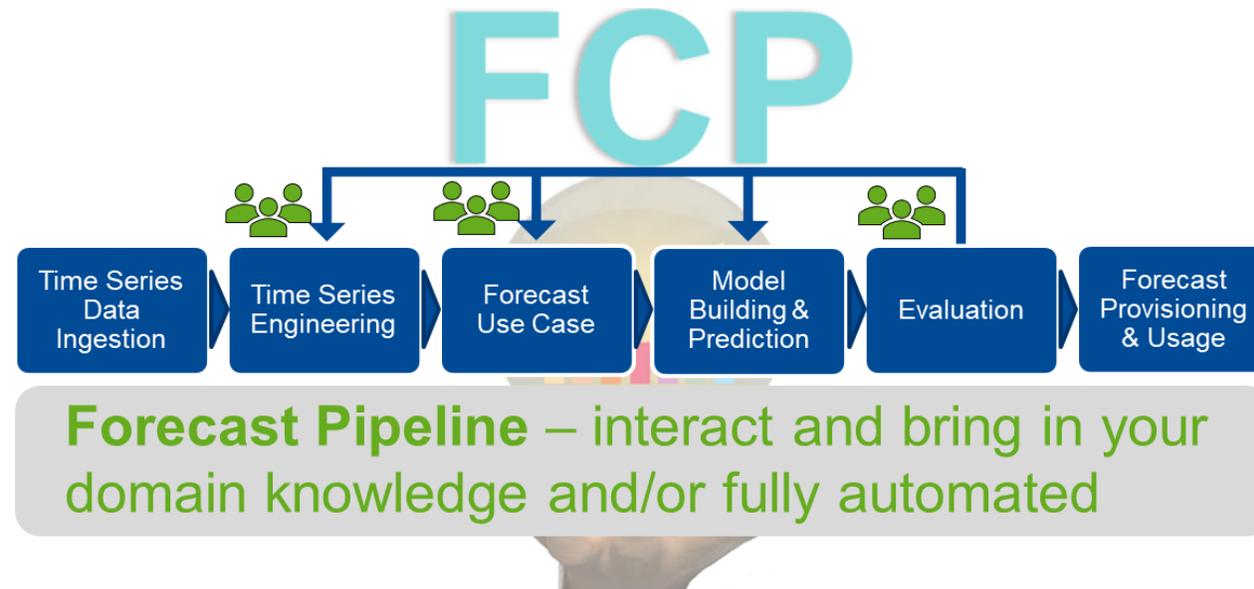
- Unsere Chemie wird in nahezu allen Branchen eingesetzt
- Wir verbinden wirtschaftlichen Erfolg, gesellschaftliche Verantwortung und den Schutz der Umwelt
- Umsatz 2023: 68,9 Milliarden €
- EBIT vor Sondereinflüssen 2023: 3,8 Milliarden €
- Mitarbeitende (31.12.2023): 111.991
- 234 Produktionsstandorte weltweit, darunter 6 Verbundstandorte
- Über 78.000 Kunden aus den verschiedensten Branchen in nahezu allen Ländern der Welt



BASF – Forecast Solutions

- 1 > Produkt Team Forecast Solutions (Digitalization → Analytics & AI)
- 2 > Was? Von der initialen Anfrage / Idee bis zum operativen Betrieb
- 3 > Wen? Kunden aus der BASF Gruppe
- 4 > Wie? Mix unterschiedlicher Rollen Solution Consultant, Software & DevOps Engineer, UI Designer, Data Scientist & Engineer

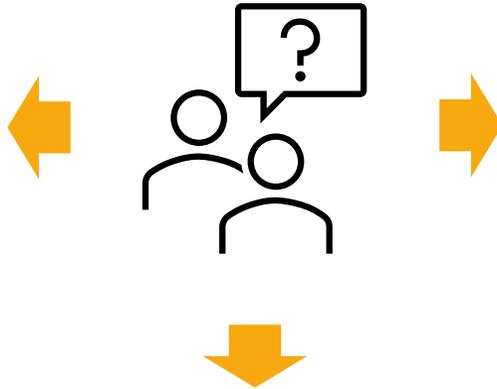
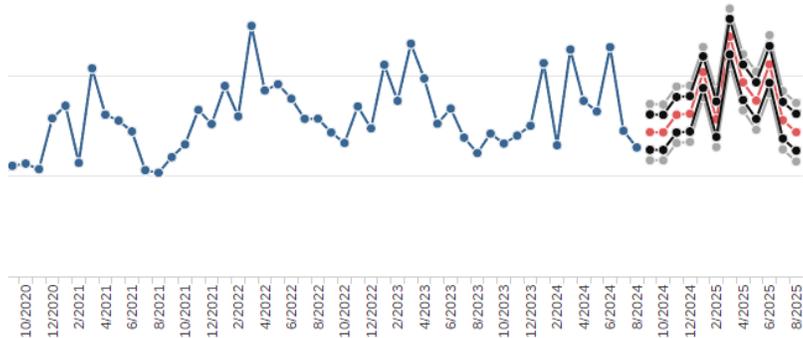
Was ist FCP?



- › In-house AI solution / Forecast Capability
- › Zielgruppe: Business Anwender und Data Scientists
- › User Interface (GUI)
- › Ca. 5000 Vorhersagen / Monat
- › “Auto-ML” (statistische und ML-Verfahren)
- › Indikatoren-Pool

02 | XAI-Fragen und Sichtweisen der Business User

Die Herausforderung



- > "Black-Box"
- > Plausibilität / Kann ich dem Forecast vertrauen?
- > Ich muss den Forecast verstehen und anderen erklären

1. Do you prefer a simple, intuitive answer over a more complex, but complete one?

- Yes
- No



2. Which question is more relevant?

Rang Optionen

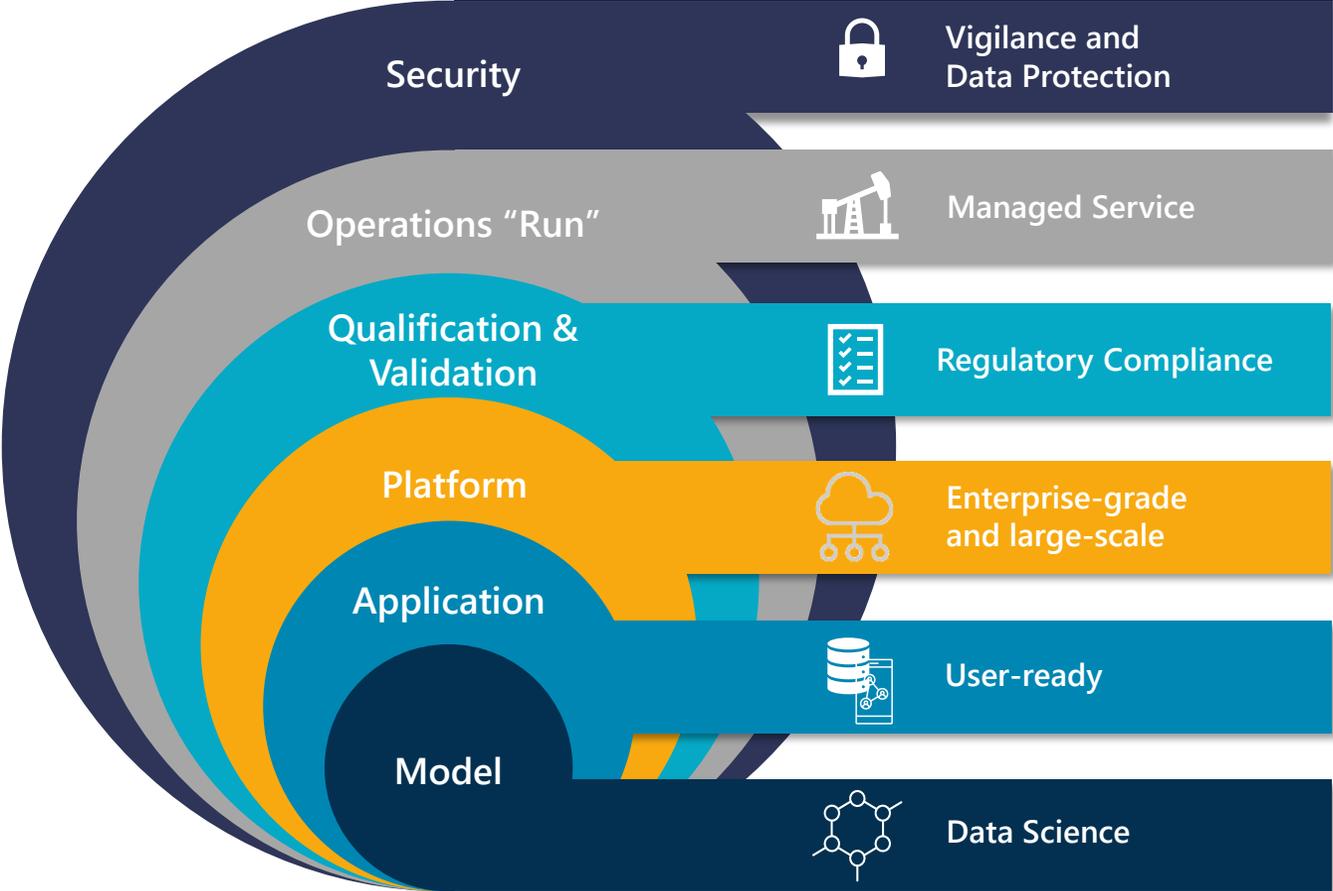


- > Welche Treiber?
- > Woher kommt die Veränderung?

**BASF internal survey (across target groups)

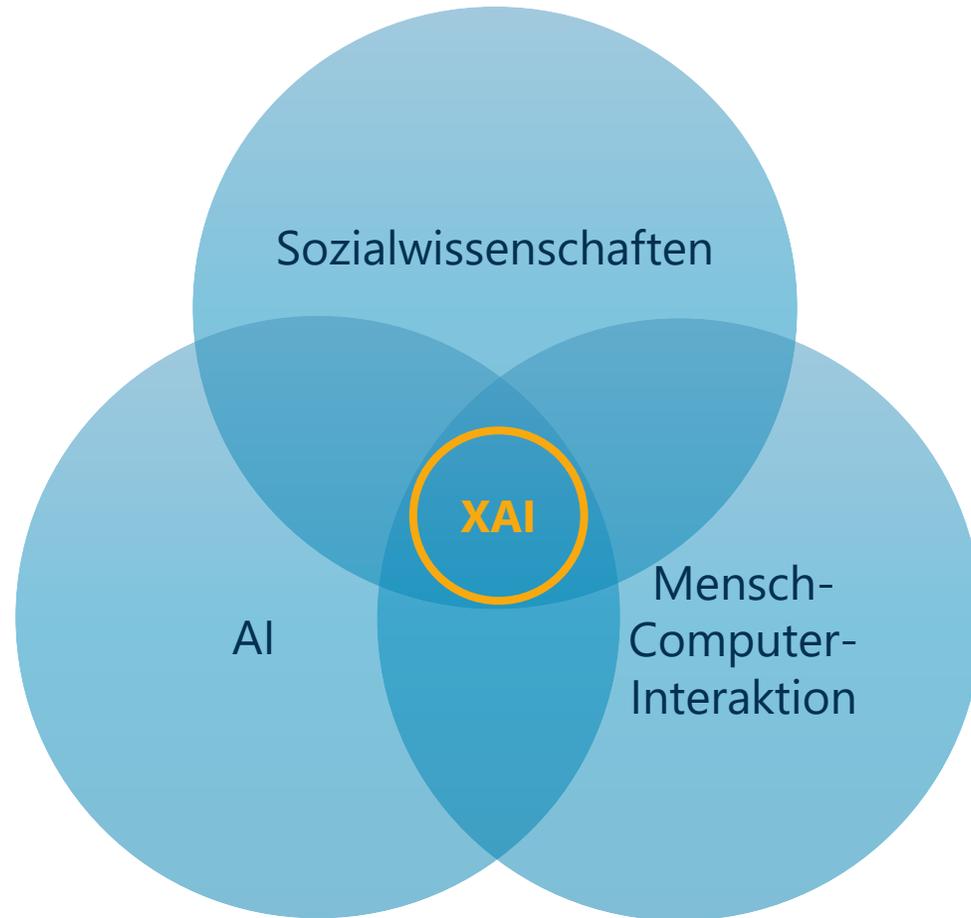
03 | Vorstellung HMS

HMS Analytical Software GmbH



04 | Einführung in XAI und SHAP-Werte

Explainable AI ist mehr als AI



Feedback essenziell: Passende Erklärung finden



Was ist eine gute Erklärung?

- Abhängig von Situation, und fragender Person
- Schwer allem zu entsprechen



Erklärungsansätze

- Model erklären
- Vorhersage erklären



Vorgehen

- Iterativ, viel Feedback von Anwendern

Bedingungen in unserem Fall



Wichtigste Einflussgrößen einer Vorhersage erklären



Zusammengefasste Features erklären (z.B. Saisonalität)



Modellunabhängig



Verschiedene Modelltypen vergleichen



Näherungen ausreichend



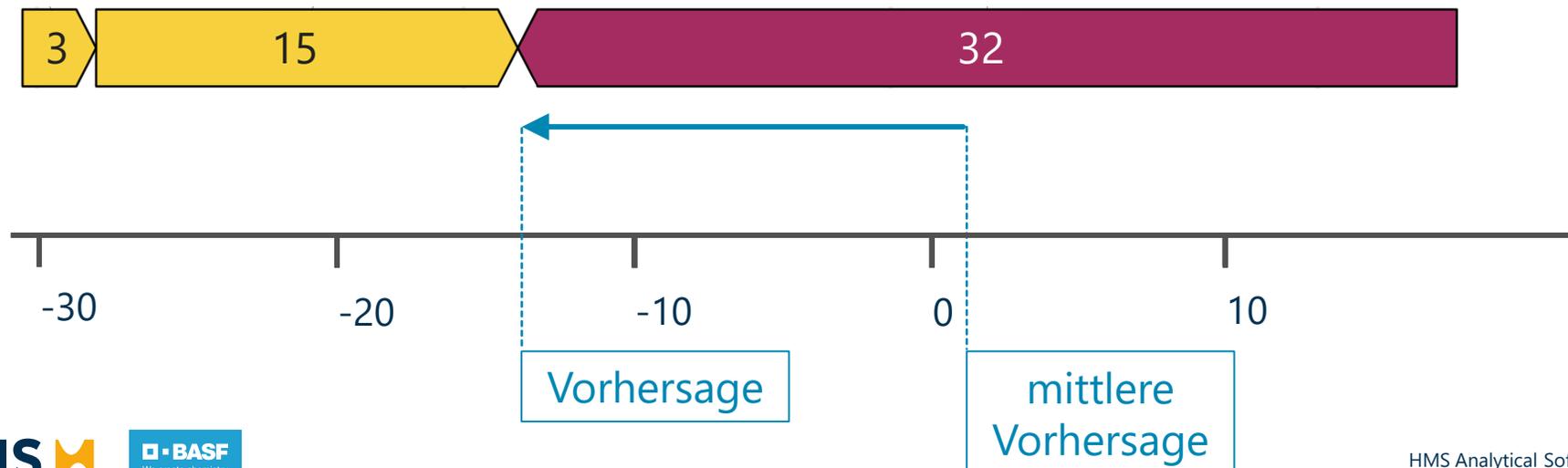
Automatisierte Ausführung in angemessener Zeit



Ausgereifte Methode und Tools

Methode: SHAP (SHapley Additive exPlanations) Werte

- **Shapley-Werte aus koalitionstheoretischer Spieltheorie**
- **Merkmalswerte** einer Dateninstanz fungieren als **Spieler in einer Koalition**
- Wir simulieren: einige Merkmalswerte spielen ("anwesend") und einige nicht ("abwesend")
- **Faire Verteilung der "Auszahlung" (= die Vorhersage) unter den Merkmalen**
- **Lineares Erklärungsmodell**
- Summe SHAP-Werte einer Vorhersage: **Differenz Vorhersage zu mittlerer Vorhersage**



05

XAI für Zeitreihen

XAI Black-Box Methoden für Zeitreihen



Noch offener Gegenstand der Forschung



Literaturrecherche zu Vergleichen von Zeitreihenvorhersagen: Negativ



Keine fertigen Zeitreihen-SHAP-Werte-Tools vorhanden

SHAP basiert auf ML-Feature-Tabellen mit konstanter Breite

- Zeitreihe abschneiden
- Näherung



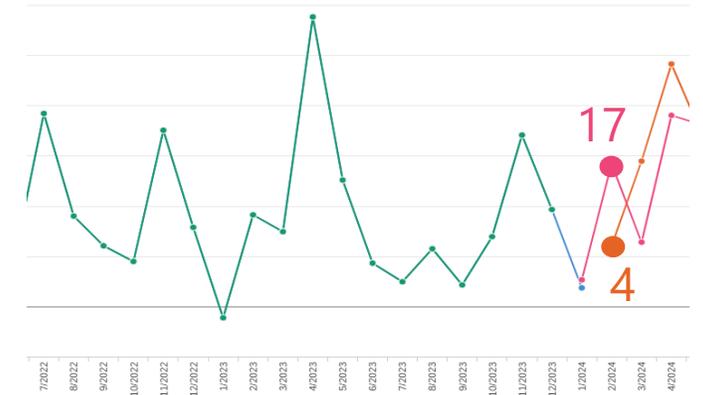
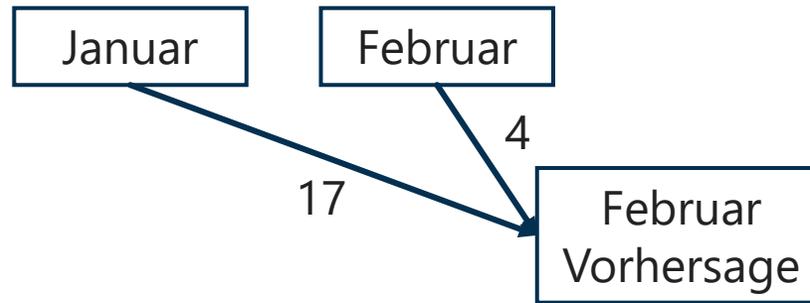
Ungenauigkeiten bei Korrelationen

- Näherung

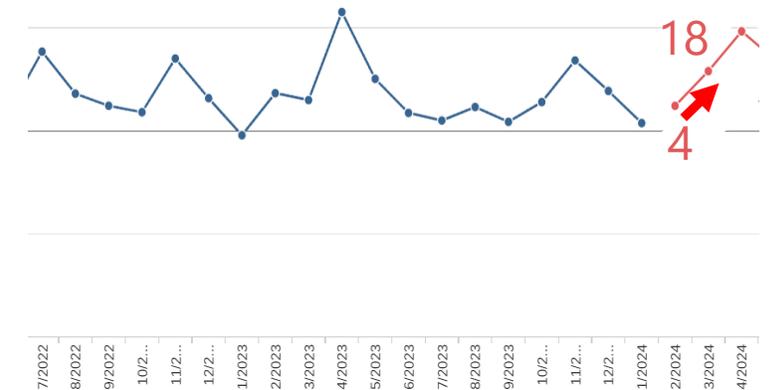
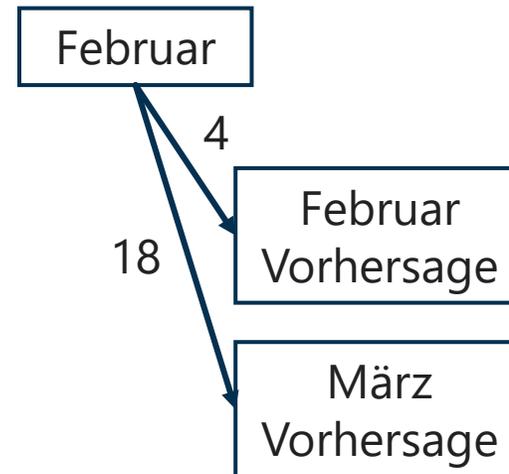


Veränderungen zwischen zwei Vorhersagen erklären

Differenz zwischen Vorhersagen für den gleichen Monat erklären



Differenz zwischen Vorhersagen für aufeinanderfolgende Monate erklären



SHAP-Werte der Vorhersagen subtrahieren

- Wir wollen die **Differenz der Vorhersagen erklären**
- Intuition: **Differenz der SHAP-Werte ist Differenz der Einflüsse**
- Mittlere Vorhersage: verschwindet näherungsweise
- Für **lineare Modelle** (z.B. ARIMA):
Entspricht Subtraktion der mit jeweiligem aktuellem Wert gewichteten Koeffizienten
$$\beta_i^{v1} x_i^{v1} - \beta_i^{v2} x_i^{v2}$$
- Mit Vorhersagen verschiedener Modeltypen möglich
 - z.B. Vergleich **xgBoost**-Vorhersage mit **ARIMA**-Vorhersage

06

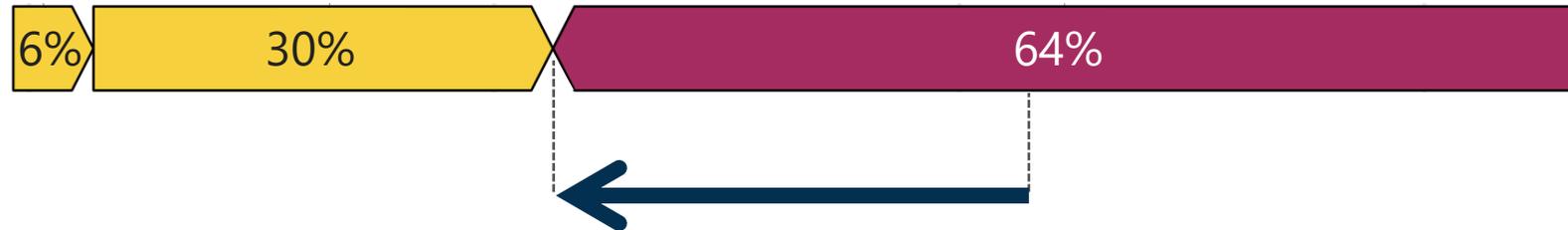
Erklärende Plots für FCP

Zusammenfassende Erklärung einer Vorhersage

Forecast influence
autoregression and seasonality

Forecast influence
Net Sales, all lags

Forecast influence
Supplier Payments, all lags



Current Forecast:

Mean forecast:

> Komplexität reduziert, zusammengefasst:

- > Autoregression
- > Saisonalität
- > Alle Monate Net Sales
- > Alle Monate Supplier Payments

Textual Summary (generated by OpenAI)

Positive Impact:

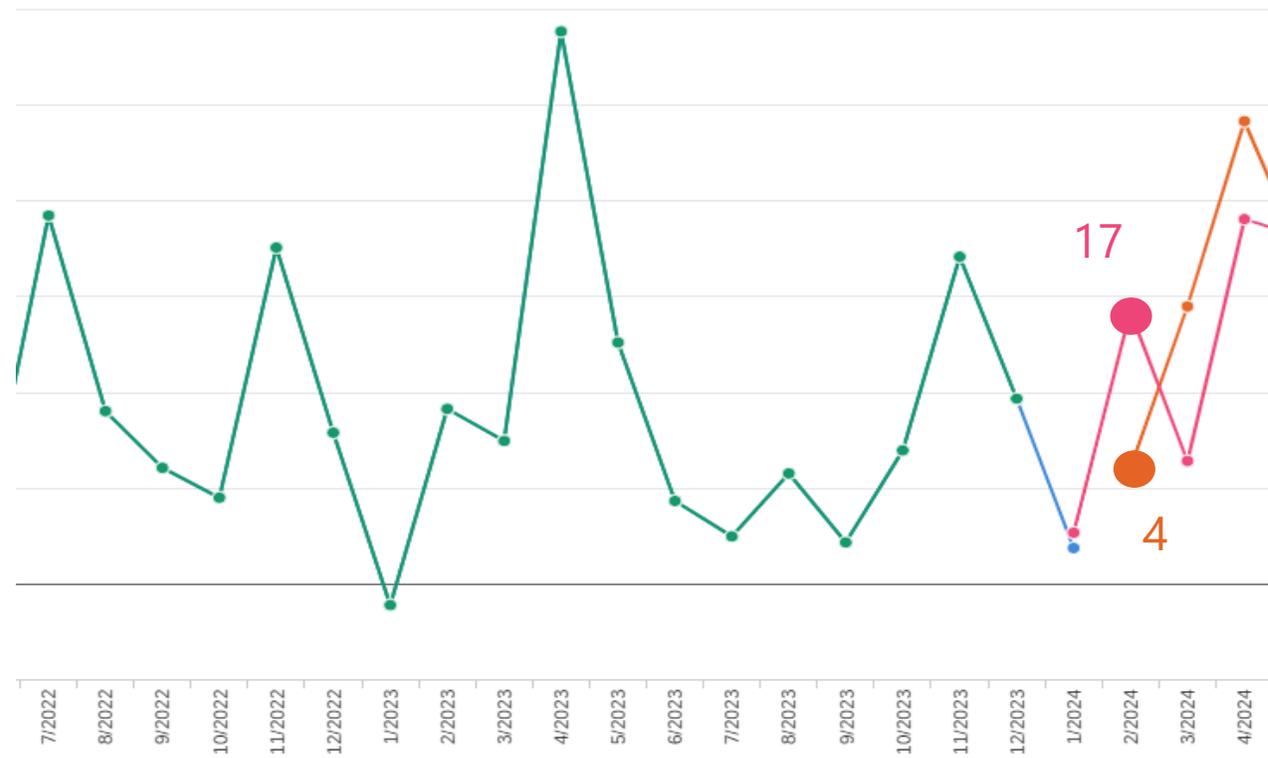
- **Net Sales:** Accounts for 30% of the overall impact on the financial forecast.
- **Autoregression and Seasonality:** Accounts for 6% of the overall impact on the financial forecast.

Negative Impact:

- **Supplier Payments:** Accounts for 64% of the overall impact on the financial forecast.

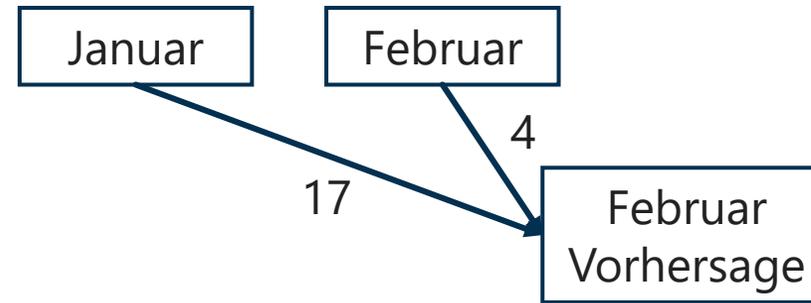
Vorhersagedifferenz

Vorhersage Februar (aus Januar): 17 vs. Vorhersage Februar (aus Februar): 4



Was kann die Änderung der Vorhersage erklären?

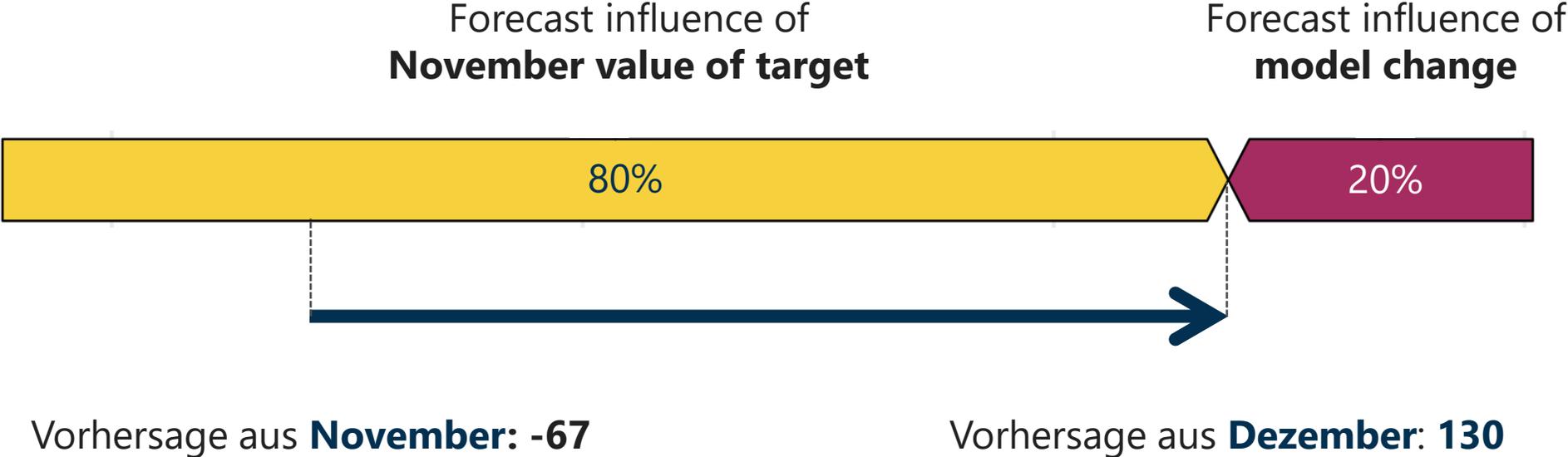
Neue Werte und Updates



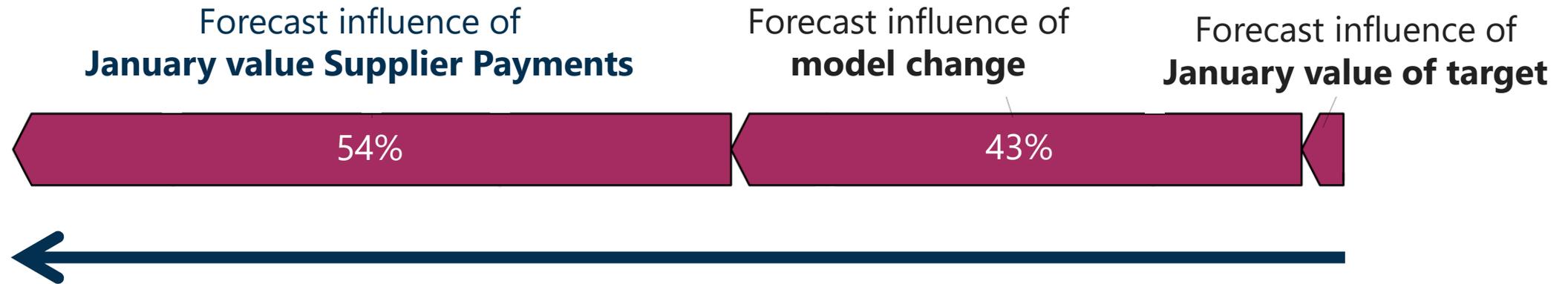
Zwei Vorhersagen zu verschiedenen Zeiten für den gleichen Monat können sich unterscheiden wegen:

- › **Neue Werte der Target Zeitreihe** (hier der Januar Wert)
- › **Neue Werte eines Indikators** (hier, der Januar Wert, wenn es keine Projektion ist)
- › **Update eines Indikator Wertes** (insbesondere bei Projektionen)
- › **Änderung des Modells** durch obige Änderungen
 - › andere Parameter
 - › andere Indikatoren
 - › anderer Algorithmus

Beispiel: Erklärung Differenz von Vorhersagen



Erklärung Differenz der Vorhersagen aus Januar und Februar



Vorhersage aus **Februar**: 4
Tatsächlicher Wert: 4,5

Vorhersage aus **Januar**: 17

Negative impacts:

- The largest negative impact on the forecast, accounting for 54% of the decrease, is attributed to the January value change of "Supplier Payments"
- Model changes contribute to 43% of the decrease in the forecast, representing the second largest negative impact.
- The January value of the target has a minor negative impact on the forecast, accounting for only 3%.

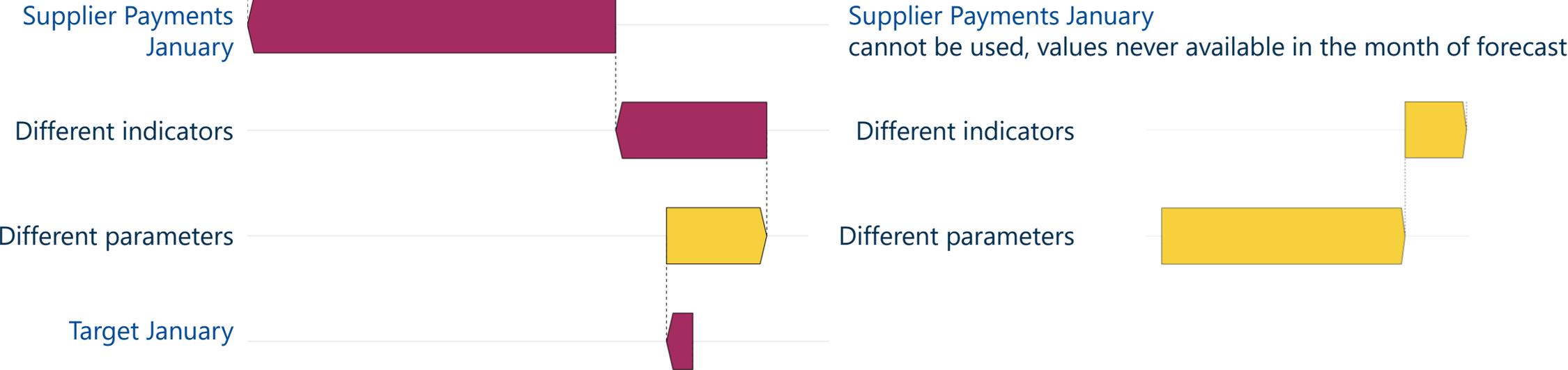
Positive impacts:

- No positive impacts were mentioned in the provided information.

Erklärung der Differenz der Vorhersagen: Mehr Details

Vorhersage aus Februar

Vorhersage aus Januar



07 | Lessons Learned

Lessons Learned

- › Wir haben **selbst** sehr viel über die **Vorhersagen und Modelle gelernt**
- › Sehr hilfreich: Stephan Sauer pflegt **guten Kontakt zu Business-Usern**, kennt deren Wünsche
- › Vergleiche **unterschiedlicher Modelle und Modelltypen** möglich, oft aber **schwierig bis wenig aussagekräftig**
 - › Zukünftig **Modelle weniger ändern zwischen zwei Vorhersagen**
- › Für manche Business User **Textuelle Erklärung wichtig**
- › **Komplexitätsreduzierung essenziell**
- › Positives Feedback von Beta-Anwendern → Nutzen wird gesehen und gefordert

- › **Next Steps:**
 - › Umsetzung und ... Innerhalb FCP / weiteres Einsammeln von Feedback + Messung der Nutzung



Vielen Dank für die Aufmerksamkeit!



Dr. Markward Britsch
Senior Data Scientist
HMS Analytical Software GmbH



Stephan Sauer
Head of Forecast Solutions
BASF Digital Solutions GmbH

data2day 19.09.2024