arXiv:2603.17575v1 [cs.LG] 18 Mar 2026

无监督符号异常检测

MdMaruf Hossain[1[0000−0002−3256−7701]] ⋆、Tim Katzke[1, 2[0009−0000−0154−7735]]⋆Simon Klüttermann[1[0000−0001−9698−4339]] ⋆和 Emmanuel Müller[1, 2[0000−0002−5409−6875]]

[1] 多特蒙德工业大学，德国多特蒙德[2] 可信数据科学与安全研究中心，鲁尔大学联盟，德国 mdmaruf.hossain@tu-dortmund.de, tim.katzke@tu-dortmund.de，Simon.Kluettermann@cs.tu-dortmund.de

摘要。 我们提出了 SYRAN，这是一种基于符号回归的无监督异常检测方法。我们的方法不再将正常模式编码到不透明的高维模型中，而是学习一组人类可读的方程，用以描述符号不变量：这些函数在正常数据上近似保持恒定。偏离这些不变量的程度可产生异常分数，因此检测逻辑从设计之初便具有可解释性，而非依赖事后解释。实验结果表明，SYRAN 具有很强的可解释性，能够提供与已知科学或医学关系相对应的方程，同时保持出色的异常检测性能，可与最先进方法相媲美。

关键词： 异常检测 · 离群点检测 · 符号回归 · 关系挖掘

1 引言

异常检测（AD）是机器学习中的一个重要问题，应用范围极其广泛，从欺诈和故障检测 [8,14,33] 到医学[4] 和科学研究 [10,20]。在本文中，我们聚焦于常见的单类设定：模型仅使用（主要是）正常样本进行训练，随后为未见过的数据分配异常分数。针对这一设定，人们已经提出了大量方法，涵盖从经典的统计方法和基于距离的方法，到现代深度神经网络方法 [22,25],；但归根结底，它们都旨在捕捉正常数据中的规律，并将偏离这些模式的情况标记为异常。

然而，尽管取得了这些进展，大多数现代异常检测算法都无法访问已识别出的这些模式。相反，这些模式通常被隐藏在一个不透明的模型中，该模型包含数千到数百万个参数。我们认为这是一个重大局限，因为异常检测常应用于高风险场景（例如医疗保健 [4]或预测性维护 [14]），而在这些场景中

⋆ 贡献相同。

确保异常检测方法按预期运行至关重要。此外，异常检测模型的黑箱行为导致公平性等领域未得到充分研究 [3]，而随着异常检测的应用日益广泛，这一点尤为关键，例如，异常检测已被用于预先筛选求职候选人 [17]。最后，也不应低估这些提取出的模式对于进一步理解现有行为的作用。许多科学发现最初都源于数据中的模式 [29] ，或是由此类模式所呈现的异常 [7]。

受这些局限的启发，我们提出$SYRAN$，这是一种通过符号不变量来建模正常性的 method。从形式上说，SYRAN 学习一组在正常数据上近似保持恒定的标量函数，并将其偏差用作异常分数。每个函数都表示为关联输入特征的符号表达式，因此产生的异常分数天然具有可解释性。与事后解释技术不同， [12], SYRAN 直接生成闭式方程，可供检查和验证，并可按需纳入后续分析或决策规则。

我们的方法受到埃米·诺特通过守恒定律描述物理系统这一观点的启发 [21], ，在概念上也与近期的代理异常检测研究相关，其中最具代表性的是 DEAN [13], 。该方法学习在正常数据上近似保持恒定的深度神经网络。SYRAN 采用了类似的不变性视角，但通过符号回归 [23] 得到符号表达式来实现代理，而非使用神经网络。这种表示方式的转变带来了若干具体挑战，本文将对此加以解决：模型容易退化为无意义的常数解；表达式结构的搜索具有组合爆炸性；以及需要在数据拟合与表达式复杂度之间取得平衡，以确保可解释性。

我们从可解释性和异常检测性能两个方面评估了我们的方法，结果表明，在常见的异常检测数据集上，我们的方法以微小的性能折衷实现了无与伦比的可解释性。此外，由于我们的模型是数学方程，因此几乎可以轻松地在所有编程语言和设备上使用。为便于复现，我们的代码已发布于 github.com/KDD-OpenSource/SYRAN。

2 相关工作

2.1 符号回归

符号回归（SR）旨在从数据中推断数学表达式，同时发现模型结构和参数 [24]。数十年来，它能够生成可解释、易于人类理解的模型，这一能力推动了大量研究 [18]。Eureqa 等知名系统 [28], 展示了 SR 从实验数据中重新发现物理定律的能力。然而，现有的大多数方法都以监督方式运行：给定输入，它们会寻找一个函数来逼近输出。与此不同，我们在此关注无监督情形（尤其是异常检测）。给定输入，我们要寻找数据中成立的关系。这比

常规监督情形更复杂，因为我们没有可直接优化的目标，可能存在多个方程，而且容易得到平凡解（考虑关系 $\sin(x)^2 + \cos(x)^2 = 1$）。

2.2 无监督异常检测

异常检测的任务是识别偏离正常模式的异常、意外或特殊样本 [6,25]。因此，异常检测的主要挑战在于理解这种正常模式。根据所用算法的不同，正常模式的编码方式也有所不同。例如，自动编码器 [27] 使用神经网络，而孤立森林 [16] 则采用树集成。然而，一个根本性的局限在于，正常模式被编码为大量难以理解的复杂参数。这会掩盖诸如学到了错误类型的正常模式 [12] 之类的情况，也限制了我们从训练好的模型中能够理解的内容。尽管已有可解释性方法 [12], ，但它们只能事后提供有限的解释。为此，我们提出 SYRAN，这是一种本质上可解释的异常检测方法，因为它由从数据中推导出的符号方程构成。

2.3 用于异常检测的符号回归

将符号回归应用于异常检测，是一个日益发展且前景广阔的研究方向。例如，[19] 使用符号回归来检测异常的轨道轨迹。类似地，[30] 使用符号方法检测金融欺诈交易，[26] 则利用符号异常检测发现机器故障。然而，这些方法远不能算是通用的异常检测方法，因为它们都严重依赖于各自具体应用领域的特征。此外，这些方法都没有采用无监督符号回归。相反，它们要么需要获取稀少且昂贵的带标签的异常，要么只是预测某个关键指标。据我们所知，我们的方法SYRAN是首个通用的符号异常检测方法：它不需要带标签的数据，并且可以应用于任何应用领域。

3 SYRAN模型

将训练数据记为 $X_{\text{train}} = \{\mathbf{x}^{(n)}\}_{n=1}^{N} \subset \mathbb{R}^d$，我们假设其中几乎全部由正常样本组成。在测试时，目标是为任意$\mathbf{x} \in \mathbb{R}$ 分配一个异常分数 $\text{score}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ ，使得分数越高表示异常程度越高。

SYRAN（面向无监督异常检测的符号回归）不再学习正常数据分布的黑箱表示，而是通过$SYRAN$ （SYmbolic Regression for unsupervised ANomaly detection）用符号不变量对正常性建模。如果函数 $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 在正常数据上近似为常数，我们就称其为不变量。不失一般性，我们将该常数固定为 1，并以此为目标

$$f(\mathbf{x}) \approx 1 \quad \text{for all } \mathbf{x} \in X_{\text{train}}. \tag{1}$$

遵循 DEAN [13], 中学习守恒量的思路，我们寻找此类函数，但将其具体实例化为人类可读的符号表达式。

3.1 学习单个符号不变量

正常数据上的不变性损失 对于候选不变量 $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$，我们通过训练数据上与 1 的平均绝对偏差来衡量它满足式 (1) 的程度：

$$L_1(f) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \big| f(\mathbf{x}^{(n)}) - 1 \big|. \tag{2}$$

最小化不变量学习目标 L_1，可促使其在 X_{train}上近似保持恒定。然而，尤其是在符号设定中，仅凭这一目标很容易得到对异常检测毫无用处的平凡解。

避免平凡解 损失 L_1 不仅可通过数据流形的有意义不变量最小化，也可通过在全局范围内保持恒定的函数，或表达式极其复杂、但在所有地方的取值都近似为 1 的函数最小化。这些函数无法区分正常样本与异常。为抑制这些平凡解，我们引入噪声对比项。我们通过从各特征的经验取值范围中独立地按均匀分布采样，生成一个辅助集合 $X_{\text{rnd}} = \{\tilde{\mathbf{x}}^{(\ell)}\}_{\ell=1}^{N_{\text{rnd}}}$：

$$\tilde{x}_j^{(\ell)} \sim \mathcal{U}\Big(\min_n x_j^{(n)},\, \max_n x_j^{(n)} \Big), \quad j = 1, \dots, d.$$

在这个随机背景上，我们定义

$$L_{\text{noise}}(f) = \frac{1}{N_{\text{rnd}}} \sum_{\ell=1}^{N_{\text{rnd}}} \big| f(\tilde{\mathbf{x}}^{(\ell)}) - 1 \big|. \tag{3}$$

使 L_1 最小化的常数函数也会产生 $L_{\text{noise}} \approx 0$。相比之下，有用的不变量应专用于正常数据流形，因此通常会在随机噪声上被违反。我们通过铰链型惩罚来编码这一偏好，该惩罚鼓励 L_{noise} 至少达到间隔 $\Delta > 0$，以防止出现近似常数解，同时避免噪声项主导优化过程。

复杂度正则化 为了获得可解释的符号不变量，我们还会对 f 的复杂度施加惩罚。设 $c(f)$ 表示表达式的非负复杂度度量（例如，与其表达式树中节点的数量和表达能力成正比）。我们定义一个饱和型复杂度惩罚

$$L_c(f) = \log\big(1 + \log(1 + c(f))\big), \tag{4}$$

其中，超参数 $\gamma > 0$ 控制该正则化的强度。双重对数可确保复杂度惩罚的边际收益递减，因此不会让中等复杂度表达式的复杂度惩罚压过数据拟合。

组合目标 将这些项组合起来，单个候选不变量 f 的损失为

$$L(f) = L_1(f) + \max\bigl(0,\, \Delta - L_{\text{noise}}(f)\bigr) + \gamma\, L_c(f). \tag{5}$$

第一项对正常数据施加近似恒定性约束，第二项通过与随机噪声形成对比来避免出现无意义的全局常数，第三项则促使符号表达式保持紧凑且易于解释。

3.2 符号参数化与优化

我们将每个不变量 f 参数化为一个符号表达式，该表达式由一组固定的运算符和函数构成，例如加法、减法、乘法、除法和常见的非线性函数（如 sin、cos、exp）。因此， f 可以表示为一棵有根表达式树，其叶节点为输入特征和常数，内部节点则为运算符。

为了在这个非凸离散搜索空间中最小化 $L(f)$，我们采用一种简单的基于树的进化符号回归算法 [11]。优化器维护一个候选表达式种群，通过变异和交叉算子生成新候选项，并选择损失较低的候选项，同时力求在整个优化过程中保持较高的多样性。原则上，任何能够计算自定义适应度函数的符号回归引擎都可以使用。

3.3 符号不变量的集成

单个不变量 f 通常只能捕捉数据中的一种简单关系。现实世界的数据集可能呈现多个近似不变量，而符号回归本质上具有随机性。因此，为提高稳健性和表达能力，SYRAN 会学习一组 M 符号不变量 $\{f_i\}_{i=1}^{M}$ ，并汇总它们的偏差。

特征装袋 为使集成具有多样性，我们采用特征装袋 [15]。对于每个集成成员 $i \in \{1, \dots, M\}$，我们无放回地抽取一组 K特征

$$S_i \subseteq \{1, \dots, d\}, \quad |S_i| = K,$$

，并限制 f_i 仅依赖于相应的坐标 $\mathbf{x}_{S_i}$。然后，我们使用相同的训练数据，将输入投影到 S_i上，并按照式（5）最小化 $L(f_i)$ 来训练 f_i 。由此得到一组简单且多样的不变量，每个不变量都聚焦于特征空间中的不同子空间。

校准与聚合 每个不变量 f_i 都会产生一个原始偏差分数

$$d_i(\mathbf{x}) = \bigl|f_i(\mathbf{x}_{S_i}) - 1\bigr|. \tag{6}$$

在实践中，集合成员的偏差尺度 $d_i(\mathbf{x})$ 可能存在很大差异：某些不变量在正常数据上始终非常接近 1，而另一些则会表现出更大的、可能具有重尾特征的偏差，因此，直接对d_i 取平均会受少数高方差分量主导。

为获得稳健的聚合结果，我们将每个分量的偏差除以其在¯训练数据上的平均偏差（记为 d_i），并将结果输入逻辑 Sigmoid 函数 σ，从而得到校准后的分量得分 s_i（$\mathbf{x}$）。最后，SYRAN通过简单平均聚合这些校准后的得分，

$$\text{score}(\mathbf{x}) = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} s_i(\mathbf{x}) \quad = \quad \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} \sigma\left(\frac{d_i(\mathbf{x})}{\bar{d}_i}\right), \tag{7}$$

其中，值越大表示对所学习符号不变量的违反程度越强，因此属于异常的可能性越高。

3.4 算法概述

完整的训练和推理流程总结于算法 1 中。在训练期间，SYRAN对特征子集进行采样，并通过符号回归学习不变量。进化过程通过在 G代中执行变异和交叉操作，迭代优化符号表达式。在测试时，每个样本都会由所有不变量进行评估，并对所得的校准后的分量得分取平均值。值得注意的是，由于集成成员函数彼此独立，训练和推理过程在很大程度上可以并行化。

算法 1 SYRAN:

输入：训练数据 $X_{\text{train}} = \{\mathbf{x}^{(n)}\}_{n=1}^{N}$，测试数据 $X_{\text{test}} = \{\mathbf{x}^{(n)}\}_{n=1}^{N}$，集成规模$M$，特征装袋规模 K，噪声裕度 Δ，复杂度权重 γ，代数 G 输出：异常分数：score(X_{test}^{m}) 1：对于 $i = 1$ 到 M 执行 2：使用 $|S_i| = K$对特征子集 $S_i \subseteq \{1, \ldots, d\}$ 进行采样 3：在 S_i 上抽取随机噪声 X_{rnd} 4：初始化随机符号表达式 $f_i^{(0)}$ 5：对于 $g = 1$ 到 G 执行 6：计算 $L(f_i^{(g-1)})$，将输入限制为 $\mathbf{x}_{S_i}$ 7：通过变异和交叉更新 $f_i^{(g-1)}$，并据此设置 $f_i^{(g)}$ 8：结束循环 9：计算平均偏差 $\bar{d}_i = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \left|f_i(\mathbf{x}_{S_i}^{(n)}) - 1\right|$10：计算测试偏差 $d_i(X_{\text{test}}^{m})$ $= \left|f_i(X_{\text{test}}^{m}) - 1\right|$11：结束循环 12：score($X_{\text{test}}^{m}$) $= \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} \sigma(d_i(X_{\text{test}}^{m})/\bar{d}_i)$

—

—

4 重新发现开普勒第三定律

为了说明 SYRAN 发掘有意义的符号不变量的能力，我们首先考虑一个受物理启发的简单示例。开普勒第三定律指出：

对于绕同一中心质量运行的天体，轨道周期的平方 T 与轨道半长轴 a的立方成正比。对单位进行重新缩放后，这一关系可写成不变量形式：

$$\frac{T^2}{a^3} \approx 1, \tag{8}$$

也就是说，数量 T^2/a^3 在不同轨道上保持不变。

我们根据已发表的 13 个绕太阳运行的天体（行星和矮行星）的轨道参数，构建了一个二维训练数据集。每个天体由其轨道周期 T 和半长轴 a描述。所有 13 个样本均被视为正常数据，并构成了本实验的 X_{train} 。我们按照第 3 节所述的方法，使用输入维度 $d = 2$ 和特征子集大小 $K = 2$应用 SYRAN，因此每个不变量都可能同时依赖于 T和 a。每个方程都是进化算法从 $G = 30000$ 种不同选项中评估得出的结果。在本例中，复杂度权重 $\gamma = 0.1$ 和噪声裕度 $\Delta = 1$ 适中，效果似乎不错，因此在本文其余部分中均采用这些设置。

作为成功与否的衡量标准，我们检查所学习到的不变量集成 $\{f_i\}$，并统计其中有多少在对 T^2 和 a^3进行简单变形后，在代数上等价于开普勒定律。在典型的一次运行中，约有 30% 的学习所得表达式属于这一类。这些不变量的示例包括

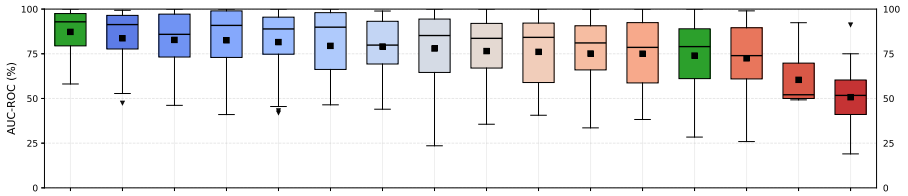
$$E_1(T,a) = \frac{(a/T)}{(T/a^2)}, \quad E_2(T,a) = \frac{(a/T)^2}{a^{-1}}, \quad E_3(T,a) = a\left(\frac{a}{T}\right)^2.$$

这表明，即使只有一小组“正常”观测数据，且对潜在规律一无所知，SYRAN 也能自动重新发现一个简洁的符号不变量，与一个著名的物理关系相符。历史上最具影响力的物理学家之一花了约 10 年才找到这个方程，而 SYRAN 只需约一分钟的计算就能做到同样的事情。因此，它为我们的方法提供了一项可解释的合理性检验，也展现了其利用数据驱动方式发现守恒量的潜力。

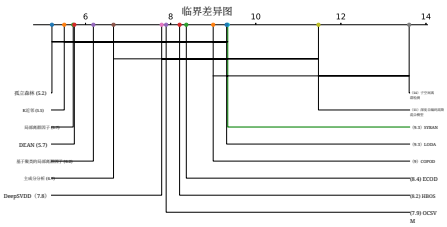
5 实验

我们在 ADBench 基准套件中的 19 个公开数据集上评估 SYRAN [6], ，这些数据集涵盖医疗保健、生化和科学数据等多种现实领域。我们将范围限定在 ADBench 中特征数不超过 30 的数据集，筛选出 21 个候选数据集。其中，fault 和 wdbc 数据集因无法保证在 2 小时的时间限制内完成优化而被排除，最终保留 19 个数据集：pima、breastw、cardio、stamps、cardiotocography、lymphography、pageblocks、glass、waveform、annthyroid、yeast、pendigits、wilt、hepatitis、wine、thyroid、wbc、vowels、vertebral。除非另有说明，所有数据集均使用同一组超参数，该组参数根据第 4 节中的实验选定：复杂度权重 $\gamma = 0.1$、噪声裕度 $\Delta = 1$ 和特征子集大小 $K = 2$。对于每个数据集，我们训练一个由 $M = 50$ 个不变量组成的集成。第 5.3 节分析这些超参数变化的影响。

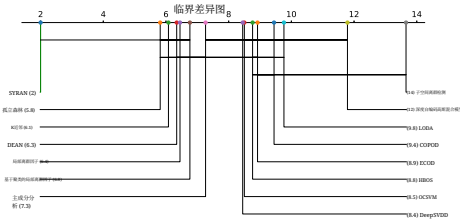
5.1 实验结果



(a) 所有纳入数据集的各算法 ROC曲线下面积 分数，按平均值排序。每个箱体中的线表示中位数，方块表示平均性能。



(b) 平均 ROC曲线下面积 的临界差异图。



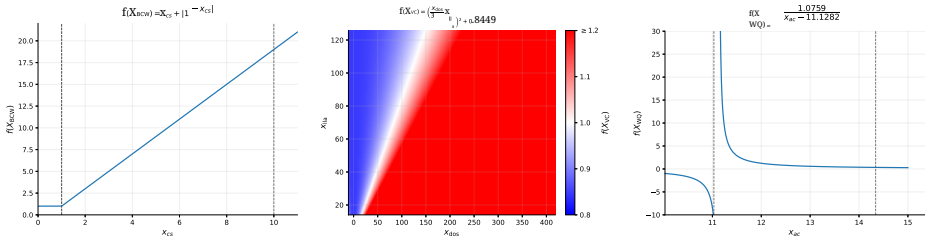
（c）最大 ROC曲线下面积的临界差异图。

图1：箱线图和临界差异图，比较了 SYRAN 集成（a、b）与其表现最佳的集成成员（a、c）相对于基线异常检测方法的 ROC曲线下面积表现。

图 1 展示了我们的方法与 14 种竞争算法的结果对比，这些结果报告于参考文献 [13]，涵盖从经典浅层方法到现代深度学习集成的各类算法。

图1a中的箱线图显示，整体集成*SYRAN*（平均值）表现具有竞争力，而每个集成中表现最佳的不变量*SYRAN*（最大值），即通过为每个数据集选择ROC曲线下面积最高的集成成员获得的结果，在各数据集上的平均性能最高。

为评估统计显著性，我们遵循标准的 Friedman–Wilcoxon检验流程。我们首先进行 Friedman检验 [5]，检测各方法之间的总体差异，然后进行两两 Wilcoxon检验 [31]，并在 $\alpha = 0.05$处采用 Bonferroni–Holm校正 [9]。图1b和图1c分别展示了集成和表现最佳的集成成员所对应的临界差异（CD）图。对于集成而言，其平均排名略逊于某些基线方法（例如局部离群因子和 DEAN），但临界差异图表明，这些差异在统计上并不显著。然而，仅使用表现最佳的集成成员时，SYRAN 的平均排名最佳，且没有任何方法显著优于它；若干表现较弱的基线方法则显著逊于它。



(a) breastw (b) vertebral (c) 葡萄酒

图2：SYRAN 在三个 ADBench 数据集上学习到的符号不变量。函数值显著偏离 1 表明存在异常行为。

这一差距凸显了利用可解释性的潜力。每个集成都包含指示性强弱不一的不变量，但正如我们将在第 5.2 节中所示，领域专家可以轻松检查并为给定应用选择最合理的不变量，从而显著提升性能，优于盲目取平均。在所考察的所有方法中，SYRAN 是唯一一种能够基于闭式方程自然支持专家参与的选择方法。此外，SYRAN 在若干数据集上仅使用一个不超过涉及两个特征的不变量，便能胜过更复杂的基线方法；这一事实表明，某些 ADBench 任务可能不适合用于评估针对高度复杂数据设计的方法。

5.2 解读学习到的方程

除了总体性能指标之外，SYRAN 还提供了可供检查和解读的显式符号不变量。在本小节中，我们分析从 ADBench 的三个代表性数据集中学习到的各个不变量。对于每个数据集，我们在图 2 中可视化了在其特征空间上具有最高 ROC曲线下面积 的单个集成成员的行为。

breastw 数据集 [32]涉及乳腺癌诊断。其中一个特征 x_{cs}以离散尺度编码细胞大小的均匀性，取值范围为 1（高度均匀）到 10（高度不均匀）；这一性质可能与恶性程度相关。在该数据集上，最佳不变量仅取决于 x_{cs} ，其形式为 $f_{\mathrm{BCW}}(x_{\mathrm{cs}}) = x_{\mathrm{cs}} + |1 - x_{\mathrm{cs}}|$，与医学直觉一致。

该**vertebral** 数据集 [2] 包含用于检测病理状况的腰椎生物力学测量数据。在此，SYRAN 学到的最具指示性的变不变量通过 $f_{\mathrm{VC}}(x_{\mathrm{dos}}, x_{\mathrm{lla}}) = \left(x_{\mathrm{dos}}/(3x_{\mathrm{lla}})\right)^2 + 0.8449.$，关联了脊椎滑脱程度 x_{dos} 与腰椎前凸角 x_{lla}，在该数据集上的ROC曲线下面积约为 90%。虽然我们未找到针对这一特定公式的直接医学参考文献，但它提示了一种合理的联合指标，值得进一步开展临床研究。

最后，**葡萄酒** 数据集 [1]描述了意大利葡萄酒的化学性质，其中一种葡萄酒类型被视为正常，其余类型则视为异常。最佳的-

表现最佳的学习得到的不变量仅取决于酒精含量 x_{ac}，其形式为 $f_{\mathrm{W}}(x_{\mathrm{ac}}) = 1.0759/(x_{\mathrm{ac}} - 11.1282)$。在 x_{ac} 的实测范围内，该表达式能有效区分正常葡萄酒与异常葡萄酒，ROC曲线下面积达到 100%。由于我们缺乏关于哪些葡萄酒类型被指定为正常类型的详细文档，因此无法确认这是否符合既有的葡萄酒学知识；然而，仅凭一个一维不变量就能完美解决该任务，这不禁令人质疑该基准用于评估异常检测方法的价值。

这三个案例说明，SYRAN 的符号不变量能够恢复已确立的领域指标，提出测量值之间新的候选关系，并揭示出仅凭单个特征即可轻易分离的数据集。

5.3 消融研究

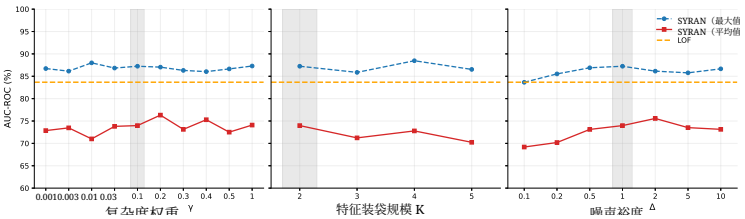


图 3：在不同超参数配置下，SYRAN 及其最佳集成成员在基准数据集上的平均 ROC曲线下面积表现，并与其最强竞争者 LOF 进行比较。默认配置以灰色突出显示。

我们的三个超参数——复杂度权重 γ、特征装袋规模 K 和噪声裕度 Δ——会同时影响可解释性和预测性能。尽管我们有意根据第 4 节中的示例选择基准超参数，以确保公平性，但这些参数很可能并非最优。因此，我们在图 3 中给出了其他超参数配置下的性能。我们每次改变一个超参数，并将其余两个保持为默认值。结果非常稳定，而且正如预期，性能甚至出现了明显提升。总体而言，我们似乎可以认为，根据第 4 节得出的默认超参数选择是合理的，但并非最优。例如，通过选择 $\gamma = 0.03$、$K = 2$、$\Delta = 2$，集成的性能变化了 $+4.39$ %，最佳成员的性能变化了 -0.05%，从而带来了显著更好的基准测试结果。然而，我们没有允许进行这样的参数变化，因为这会构成不公平的比较，而且这些变化可能无法泛化。

除了异常检测性能外，我们学习到的方程的可解释性也是一项重要指标。这主要受超参数 γ 的影响。因此，我们在表1中列出了 breastw [32] 数据集上不同 γ 值对应的最佳方程，表明我们可以在高性能与所学习方程的高表达能力之间进行权衡。

表1：复杂度权重对 breastw 数据集 [32] 符号表达式的影响。这里， x_i 表示数据集的第 i 个特征（x_2 对应于第 5.2 节中的 x_{cs} ）。我们列出了每个 γ 的最佳集成成员方程。

复杂度权重 γ	**最佳方程**	**ROC曲线下面积**（%）
0.001	$\left(\frac{1.0500}{x_3}\right)^{x_6 \cdot (-0.0526) \cdot 2.2257}$	99.19
0.01	$x_2^{\text{余弦}\left(\frac{-1.6023}{x_4}\right)}$	97.60
0.10	$x_2 + \lvert 1 - x_2 \rvert$	97.73
0.50	x_2	97.73

6 结论

SYRAN 表明，符号回归可以作为一种可行且可解释的无监督异常检测方法。它学习由人类可读的符号不变量构成的集成，这些不变量在正常数据上近似保持恒定；其优化方式通过强制保持恒定、利用随机噪声对比惩罚平凡常数，并控制表达式复杂度，以优先生成紧凑方程。

在实验中，SYRAN 重新发现了开普勒第三定律，并在 19 个 ADBench 数据集上取得了与黑盒基线相当的 ROC 曲线下面积表现，同时生成闭式异常分数，能够复现已知的医学指标、揭示新的关系，并发现既有基准中潜在的缺陷。这些特性使 SYRAN 非常适用于专家引导的异常检测。未来的工作包括扩展至更高维数据和时序数据，并纳入约束或先验，以提升可解释性和检测准确率。

致谢。 这项研究得到了可信数据科学与安全研究中心（https://rc-trust.ai）的支持。该中心是鲁尔大学联盟（https://uaruhr.de）旗下的研究联盟中心之一。

参考文献

1. Aeberhard, S., Forina, M.: 葡萄酒。UCI机器学习知识库（1992） 2. Barreto, G., Neto, A.: 脊柱。UCI机器学习知识库（2005） 3. Ding, X., Xi, R., Akoglu, L.: 揭示离群点检测偏差：通过以数据为中心的因素理解算法偏差的来源。载于：AAAI/ACM人工智能、伦理与社会会议论文集。第7卷，第384–395页（2024） 4. Fernando, T., Gammulle, H., Denman, S., Sridharan, S., Fookes, C.: 用于医学异常检测的深度学习——综述。ACM计算调查（2022） 5. Friedman, M.: 针对m个排名问题的替代显著性检验比较。《数学统计年刊》11，86–92（1940） 6. Han, S., Hu, X., Huang, H., Jiang, M., Zhao, Y.: ADBench：异常检测基准。载于：神经信息处理系统（NeurIPS）（2022） 7. Hanson, N.R.: 正电子概念：一项哲学分析。剑桥大学出版社（1963）

8. Hilal, W., Gadsden, S.A., Yawney, J.: 金融欺诈：异常检测技术与最新进展综述。《Expert Systems with Applications》**193**，116429（2022） 9. Holm, S.: 一种简单的序贯拒绝多重检验程序。《Scandinavian Journal of Statistics》**6**(2)，65–70（1979） 10. Kinney, D., Kempes, C.: 天体生物学中的认识论与异常检测。《Biology & Philosophy》**37**(4)，22（2022） 11. Klüttermann, S.: 采用伊辛模型进行进化优化。《arXiv》**abs/2511.15377**（2025） 12. Klüttermann, S., Balestra, C., Müller, E.: 通过夏普利值高效解释离群点检测集成。载于：亚太知识发现与数据挖掘会议论文集。第43–55页。施普林格（2024） 13. Klüttermann, S., Katzke, T., Müller, E.: 无监督代理异常检测。载于：欧洲机器学习与数据库知识发现联合会议论文集。第71–88页。施普林格（2025） 14. Klüttermann, S., Peka, V., Doebler, P., Müller, E.: 面向预测性维护的高效异常检测。载于：国际机器学习与应用会议（ICMLA）论文集。第1691–1696页。IEEE（2024） 15. Lazarevic, A., Kumar, V.: 用于离群点检测的特征装袋。载于：ACM SIGKDD知识发现与数据挖掘国际会议论文集。第157–166页（2005） 16. Liu, F.T., Ting, K.M., Zhou, Z.H.: 孤立森林。载于：国际数据挖掘会议（ICDM）论文集。第413–422页。IEEE（2008） 17. Ma, M., Han, L., Zhou, C.: 基于Transformer的异常检测模型研究与应用：文献综述。arXiv **abs/2402.08975**（2024） 18. Makke, N., Chawla, S.: 符号回归助力可解释科学发现：综述。《Artificial Intelligence Review》**57**(1)（2024） 19. Manzi, M., Vasile, M.: 利用深度符号回归进行轨道异常重建。载于：国际宇航大会（IAC）论文集（2020） 20. Mikuni, V., Nachman, B., Shih, D.: 在线兼容的无监督非共振异常检测。《Physical Review D》。**105**(5)（2022） 21. Noether, E.: 不变变分问题。《哥廷根科学学会消息：数学物理学部》，第235–257页（1918） 22. Olteanu, M., Rossi, F., Yger, F.: 离群点与异常检测元综述。《Neurocomputing》**555**，126634（2023） 23. Paisner, M., Cox, M.T., Perlis, D.: 使用生长型神经气进行符号异常检测与评估。载于：人工智能工具国际会议论文集。第175–181页（2013） 24. Radwan, Y.A., Kronberger, G., Winkler, S.: 符号回归近期算法与遗传编程的比较。arXiv **abs/2406.03585**（2024） 25. Ruff, L., Kauffmann, J.R., Vandermeulen, R.A., Montavon, G., Samek, W., Kloft, M., Dietterich, T.G., Müller, K.R.: 深度与浅层异常检测统一综述。《IEEE 会议录》**109**(5)，756–795（2021） 26. Safikou, E., Pattipati, K.R., Bollas, G.M.: 利用推断传感器进行故障诊断与预测：融合符号回归和信息论的混合方法。《IEEE Access》（2025） 27. Sakurada, M., Yairi, T.: 使用具备非线性降维功能的自编码器进行异常检测。载于：MLSDA 2014第二届传感数据分析机器学习研讨会论文集。第4–11页（2014）

28. Schmidt, M., Lipson, H.：从实验数据中提炼自由形式自然定律。《科学》 **324**(5923)，81–85（2009）29. Tolle, K., Tansley, S., Hey, T.：第四范式：数据密集型科学发现 [观点]。《IEEE 会议录》**99**，1334–1337（2011 年 8 月）30. Visbeek, S., Acar, E., den Hengst, F.：运用深度符号分类实现可解释欺诈检测。载于：世界可解释人工智能大会。第 350–373 页。施普林格（2024）31. Wilcoxon, F.：基于排序方法的个体比较。《生物统计学通报》**1**(6)，80–83（1945）32. Wolberg, W.：威斯康星州乳腺癌（原始）。UCI 机器学习知识库（1990）33. Zhang, M., Alvarez, R.M., Levin, I.：选举取证：利用机器学习和合成数据进行选举异常检测。《公共科学图书馆·综合》 **14**(10)（2019）