The Weisfeiler-Leman Dimension and the Speed of Color Stabilization — Logical and Algorithmic Aspects

Oleg Verbitsky

Humboldt University of Berlin

Symmetry vs Regularity, Pilsen, 3 July, 2018

Color refinement algorithm, a.k.a. WL[1]



The initial coloring C^0 is monochromatic.

Color refinement algorithm, a.k.a. WL[1]



A color refinement step: $C^{i+1}(v) = C^i(v) \mid \{\!\!\{ C^i(u) \}\!\!\}_{u \in N(v)}$

Note that $C^1(v) \equiv \deg v$

Color refinement algorithm, a.k.a. WL[1]



The next color refinement: $C^2(v) = C^1(v) \mid \{\!\!\{ C^1(u) \}\!\!\}_{u \in N(v)}$



The color partition is refined in each step. Once it stabilizes, we can terminate.



Input graphs: C_{12} and $2C_6$



The initial coloring C^0 of V^2 : "edges" for (u, v) s.t. $u \sim v$, "non-edges" for (u, v) s.t. $u \not\sim v$, "vertices" for (u, v) s.t. u = v.





A color refinement step:

$$C^{i+1}(u,v) = C^{i}(u,v) \mid \left\{\!\left\{C^{i}(u,w) \mid C^{i}(w,v)\right\}\!\right\}_{w \in V}$$





The next color refinement step: $C^2(u,v) = C^1(u,v) \mid \left\{\!\!\left\{ C^1(u,w) \mid C^1(w,v) \right\}\!\!\right\}_{w \in V}$

The non-isomorphism recognized.





The next color refinement step: $C^3(u,v) = C^2(u,v) \mid \left\{\!\!\left\{ \, C^2(u,w) \mid C^2(w,v) \,\right\}\!\!\right\}_{w \in V}$

The color partition stabilized.

The k-dimensional Weisfeiler-Leman algorithm WL[k]

The 4×4 rook's graph and the Shrikhande graph (3D printing by Jonathan Gerhard)





The k-dimensional Weisfeiler-Leman algorithm WL[k]

The 4×4 rook's graph and the Shrikhande graph (3D printing by Jonathan Gerhard)





WL[3] distinguishes between these two SRGs(16,6,2,2). The initial coloring C^0 of V^3 : according to the equality type of (x_1, x_2, x_3) and the isomorphism type of $G[x_1, x_2, x_3]$. Color refinement step: $C^{i+1}(x_1, x_2, x_3) = C^i(x_1, x_2, x_3) \mid \{ C^1(w, x_2, x_3) \mid C^1(x_1, w, x_3) \mid C^1(x_1, x_2, w) \} \}_{w \in V}$

The Weisfeiler-Leman dimension of a graph

Definition

 $\dim_{WL}(G)$ is equal to the minimum k such that WL[k] distinguishes G from every non-isomorphic graph H.

A basic observation

If $\dim_{WL}(G) = O(1)$ for all G in a class of graphs C, then the isomorphism problem for C is solvable in polynomial time.

Examples:

- $\dim_{WL}(G) = 1$ if G is a tree [Edmonds 65]
- $\dim_{WL}(G) \leq 3$ if G planar

[Kiefer, Ponomarenko, Schweitzer 2017]

- $\dim_{WL}(G) \le 2$ if G is an interval graph [Evdokimov, Ponomarenko, Tinhofer 2000]
- $\dim_{WL}(G) \le k + 1$ if $\operatorname{tw}(G) \le k$ [Grohe, Mariño 1999]

Theorem (Arvind, Köbler, Rattan, V. 2015; Kiefer, Schweitzer, Selman 2015) Given a graph G, one can efficiently recognize whether or not $\dim_{WL}(G) = 1.$

Remark: If the same would be possible for dimension 2, then for a given strongly regular graph we could efficiently decide whether or not it is uniquely determined by its parameters.















Definition

Let $\operatorname{Stab}_k(G)$ denote the number of refinement rounds that WL[k] performs on input G until stabilization.

Example:

•
$$\operatorname{Stab}_1(P_n) = \lfloor (n-1)/2 \rfloor$$
 while $\operatorname{Stab}_2(P_n) \le \lceil \log_2 n \rceil$.

Theorem (Babai, Erdős, Selkow 1980)

 $\operatorname{Stab}_1(G) \leq 2$ for almost all G and, moreover, the stable partition consists of singletons.

Corollary

The average case of Graph Isomorphism is solvable in linear time.

Theorem (Bollobás 1982)

 $\operatorname{Stab}_2(G) = O(\log \log n)$ for almost all regular G of a fixed degree.

Here and below n denotes the number of vertices in G.

Importance of fast stabilization II

An observation

Suppose that

 $\dim_{\mathit{WL}}(G) \le k$

for all ${\it G}$ in a class of graphs ${\mathcal C}$ and, moreover,

$$\operatorname{Stab}_k(G) = O(\log n).$$

Then the isomorphism problem for C is solvable in polylogarithmic time using polynomially many parallel processors.



- QP quasi-polynomial time
- P polynomial time
- NC parallel polylogarithmic time

Suppose we are given two non-isomorphic graphs.



We want to *succinctly* express the reasons *why* these graphs are non-isomorphic.

Vocabulary:

- = equality of vertices
- $\sim\,$ adjacency of vertices

Syntax:

Moreover:

 $\exists^{\geq m}, \exists^{=m} \text{ etc. counting quantifiers}$

Logic behind WL[k]



Example: True for both graphs

$$\exists^{=12} x \, (x=x) \wedge \forall x \, \exists^{=2} y \, (y \sim x).$$

Logic behind WL[k]



True for C_{12} but false for $2C_6$:

 $\forall x \,\forall y \,\operatorname{dist}_{\leq 6}(x, y),$

where ${\rm dist}_{\leq n}(x,y)$ is an expression for ``x and y are at distance at most n from each other"

Succinctness of logical expressions

1st version: n+1 variables, quantifier depth n-1

$$dist_{\leq 1}(x,y) \stackrel{\text{def}}{=} x \sim y \lor x = y$$
$$dist_{\leq n}(x,y) \stackrel{\text{def}}{=} \exists z_1 \dots \exists z_{n-1} \Big(dist_{\leq 1}(x,z_1) \land dist_{\leq 1}(z_1,z_2) \land \dots$$
$$\dots \land dist_{\leq 1}(z_{n-2},z_{n-1}) \land dist_{\leq 1}(z_{n-1},y) \Big)$$

• $\forall x(\forall y(\exists z(\ldots))) - \text{depth } 3; \ (\forall x \ldots) \land (\forall y \ldots) \land (\exists z \ldots) - \text{depth } 1$

Succinctness of logical expressions

1st version: n+1 variables, quantifier depth n-1

$$dist_{\leq 1}(x,y) \stackrel{\text{def}}{=} x \sim y \lor x = y$$
$$dist_{\leq n}(x,y) \stackrel{\text{def}}{=} \exists z_1 \dots \exists z_{n-1} \Big(dist_{\leq 1}(x,z_1) \land dist_{\leq 1}(z_1,z_2) \land \dots$$
$$\dots \land dist_{\leq 1}(z_{n-2},z_{n-1}) \land dist_{\leq 1}(z_{n-1},y) \Big)$$

•
$$\forall x(\forall y(\exists z(\ldots))) - \text{depth } 3; (\forall x \ldots) \land (\forall y \ldots) \land (\exists z \ldots) - \text{depth } 1$$

2nd version: 3 variables, quantifier depth $\lceil \log_2 n \rceil$ $\operatorname{dist}_{\leq n}(x, y) \stackrel{\text{def}}{=} \exists z \left(\operatorname{dist}_{\leq \lfloor n/2 \rfloor}(x, z) \land \operatorname{dist}_{\leq \lceil n/2 \rceil}(z, y) \right).$

A logical characterization of $\mathsf{WL}[k]$

Theorem (Cai, Fürer, Immerman 1992)

 WL[k] distinguishes G and H iff G and H are distinguishable by a (k + 1)-variable sentence with counting quantifiers.

Ø Moreover,

G and H are distinguishable by a sentence with k + 1 variables of quantifier depth r + 1

₩

WL[k] distinguishes G and H after r rounds

∜

G and H are distinguishable by a sentence with k + 1 variables of quantifier depth r + k Three reasons why the logical characterization is useful

- A sentence defines a graph G if it is true on G and false on any non-isomorphic graph. If we prove that each graph G in a class C is definable by a sentence with k + 1 variables, we know that the isomorphism problem for G is solvable by WL[k]. A prominent example:
 - any class of graphs excluding a fixed minor [Grohe 2012]

Three reasons why the logical characterization is useful

A sentence defines a graph G if it is true on G and false on any non-isomorphic graph. If we prove that each graph G in a class C is definable by a sentence with k + 1 variables, we know that the isomorphism problem for G is solvable by WL[k]. A prominent example:

• any class of graphs excluding a fixed minor [Grohe 2012]

② If we show that, moreover, each $G \in C$ is definable with quantifier depth $O(\log n)$, then the isomorphism problem for G is solved even in NC.

Three reasons why the logical characterization is useful

A sentence defines a graph G if it is true on G and false on any non-isomorphic graph. If we prove that each graph G in a class C is definable by a sentence with k + 1 variables, we know that the isomorphism problem for G is solvable by WL[k]. A prominent example:

• any class of graphs excluding a fixed minor [Grohe 2012]

- **②** If we show that, moreover, each $G \in C$ is definable with quantifier depth $O(\log n)$, then the isomorphism problem for G is solved even in NC.
- Solution Logic gives us a useful working tool the Ehrenfeucht game.



Two players: Spoiler and Duplicator





Two players: Spoiler and Duplicator





Two players: Spoiler and Duplicator





Two players: Spoiler and Duplicator



Two players: Spoiler and Duplicator



Two players: Spoiler and Duplicator



Two players: Spoiler and Duplicator



Two players: Spoiler and Duplicator



Two players: Spoiler and Duplicator



Two players: Spoiler and Duplicator



Two players: Spoiler and Duplicator

Conclusion: If G is connected and H is disconnected, then Spoiler wins with 3 pebbles in $O(\log n)$ moves \implies G and H are distinguishable with 3 variables and quantifier depth $O(\log n) \implies$ WL[2] distinguishes G and H making $O(\log n)$ refinement rounds

Comments:

- We have just seen a simplified version of the game, which corresponds to logic without counting.
- The game is useful in proving both positive and negative results.

Theorem (Cai, Fürer, Immerman 1992)

There are infinitely many regular graphs G of degree 3 with $\dim_{WL}(G) > 0.004 n$.

A positive example

Recall that every tree T has $\dim_{WL}(T) = 1$ or, equivalently, is definable using 2 variables. For some trees we need linear quantifier depth. This can be improved:

• one extra variable \implies logarithmic depth !

Theorem

Every *n*-vertex tree *T* is definable with 3 variables and quantifier depth $\leq 3 \log n$.

A positive example

Recall that every tree T has $\dim_{WL}(T) = 1$ or, equivalently, is definable using 2 variables. For some trees we need linear quantifier depth. This can be improved:

• one extra variable \implies logarithmic depth !

Theorem

Every *n*-vertex tree *T* is definable with 3 variables and quantifier depth $\leq 3 \log n$.

Proof idea:

- Consider non-isomorphic trees T and T'.
- We can suppose that the diameters of T and T' are equal for else Spoiler wins with 3 pebbles in logarithmically many moves.
- For simplicity, assume that the diameter is even, hence both T and T' have a unique central vertex.
- If Spoiler pebbles the central vertex in one of the trees, Duplicator is forced to respond with the central vertex in the other tree (for else he loses in a log number of rounds).

${\tt cont'd}$

- In this way, Spoiler can play as if T and T' were directed trees rooted at their central vertices.
- Since $T \not\cong T'$, T and T' differ by the number of branches of some isomorphism type from the root.
- Spoiler can force further play on non-isomorphic branches. He repeats this, making the branches each time smaller.
- To speed up, Spoiler marks a branch by pebbling its *separator*. A vertex v is a separator of T if every connected component of T - v has size at most n/2. The most non-obvious part of the argument is that 3 pebbles are still enough.

History of the tree isomorphism problem

Theorem

Every *n*-vertex tree *T* is definable with 3 variables and quantifier depth $\leq 3 \log n$.

Testing isomorphism of trees is

- in Lin-Time by CR
- in NC if $\Delta = O(\log n)$
- in NC
- in Log-Space

[Edmonds 1965] [Ruzzo 1981] [Miller-Reif 1991] [Lindell 1992]

Miller and Reif [SIAM J. Comput. 1991]: "No polylogarithmic parallel algorithm was previously known for isomorphism of unbounded-degree trees."

However, the $3\log n\text{-round}$ WL[2] solves it in NC and is known since 1968 !

50 years of WL[2]

ПРИВЕДЕНИЕ ГРАФА К КАНОНИЧЕСКОМУ ВИДУ И ВОЗНИКАЮЩАЯ ПРИ ЭТОМ АЛГЕБРА

Рассматривается алгориты приведения заданного конечного мультиграфа Г к на-алтебра 👥 (Г). Изучение свойств алгебры 🔮 (Г) оказывается полезным при решении накоторых задач теорин графоз-

and the second second

УДК 519.1

Выдантаются и обсуждаются некоторые прадположения относительно саязи видаитаются и овсуждаются немитона приложение града Анг (Г). Построем между свойствами алгебры 12 (Г) и группой ватиорофизион града Анг (Г). Построем примар некоринализанието града Г, витебра 21 (Г) которого совладает с группозой алгеброй некоторой некоммутативной группы.

acressed assocracy measury remains from. An algorithm is combined, metanging the specified finite multigraph (to canonical term. In the scores of this reduction, a new inversion () proved laples (specifical Q() Saled of the production. Some presentations conversing the relationship subjects the properties of the algobre Q(() and the graph's antenempticity where the () are discussed. An asample of inversion of the algobre Q(() and the graph's measurements where the properties of the algobre Q(() and the graph's measurements where the production of the algobre Q(() and the graph's measurements where the production of the algobre Q(() and the graph's measurements where the production of the algobre Q(() and the graph's measurements where the production of the algobre Q(() and the graph's measurements where the production of the state of the stat algebra QI (f) coincides with the group algebra of a non-commutative group.

L Рассмотрым произвоацам? консумый граф Г и его натрику сменносте укој јенијј, коне иј-чиско укојр, ис-јуцит за 1-а веризна графа в јукој 1, ј=1, 2, ..., и. В случе неоразтвроезного графа полателе и иј-вају, Кансинтеским видон графа на буден језивата его матрицу смемности при канолической нумерации вершин, т. с. при таком частичном упорядочения множества першин, при котором из того, что унорадствия иналист и ирали, кра которов оз ото, что и и 5 неграпилы сладует, что существует затоморфны графа, переодящий вершину и в 5 и сохраняющий отношение CMENNOCTI

В п. 6.7 описан процесс приведения графа и каноническом) в п. о. гозятки приско дряговани траст и Алин траст и жиду, состоящий в доотанное прерупорядоении страст и столбающ матрицы А (Г), который, грубо говоря, сводится к CARENOLLERY.

Рассмотрим для простоты неорпентированный граф без налими слядей. Спачаля каждой першине графя сопоставные оралова отластический натион нарилие графа соностяная характеристический натион принставляная компонента которого разна числу солский данной вершины. Зотем разобым вершими на дляссы, так чтобы вершины с однаховым характе растическим вектором призадлежали одному классу; классы при этом упорядочим в спответствии с естественным порядком в иножестве характеристических лекторов. Далее, каждой вершине солоставим инрактерастической вектор $v_t = \{l, v_t, ..., v_t\}$ propagate the pro-there counter a reason of the pro-the -нокер ялесся, к которому принадлежит 1-2я лершита. Теперь снова разобыем вершиные на классы в спответствии с колими характеристическими векторами, упорядоченными новыка зарактерикалистика: некоторыка, улерностаниям неконографически, и т. д. Заметны, что есля вершины в в в на зекотором шате принадлежаля резным классам и было аклонно условие с<6, то в в дальняйшем это тсловие вогла будет выполнено. Отсода следует, что описаный процесс образнается на разлам классам (т. с. построкая намоизческая нумерация), либо дальнейшего разбрения на классы не процексолт.

в случае, если Г-орнектированный мультиграф, возькем в случет, е.А.п. і портактичного актора ту упорадоченную в качества характиченствического актора ту упорадоченную 1-ую строку матрицы А (Г) (считая при этом, что диагональ. ных влемент предшествуят всем остальным). Вместо различных элементов ој/ вледем различные незорисныме перемонные ка, кана и порадом и контактствии с порадком среди ед. Балуантур такжа способом матрину оболнани X = X (Г). При очередном разбнании вершия на классы и одному кларсу, как и пражде, отнесем вершины с одноковым хорактери стическим вектором; при этом А-ая компонента лектора од есть до определению сумма элементов /-ой строон матрицы есть на опрементацію сумма значні А-го какса (прадидущего Х (Г), соответствующих першикам А-го какса (прадидущего разбивансь). Матриця Х (Г) разбиванска, таким образом, на блоки, в жендом из которых мы можем ввести свои незави соляе, в кандон по которых но можен писсти сосе издане-спыле перьменные и т. д. (топное определение этох сперений см. п. 6, отврания (д. б.). Заметам, что описания до сах пор процедура акалегична

метолан, пласокелным в [1] и [2].

Пля дальнейшего разбиения вершия на классы рассмотрим алемент изу матрица U=X-X', где X'-матрица, получения на Х заманой переналинах х2, х2, ... переменными х3, х2, ..., полнем дое переменные x1, x2, ..., x1, x2, ... пераписямы. Влемент из излается многочлалом второй стейски от ла, л. ..., х., х. Если теперь обозначить различные многочлены DESCRIPTIONE SOCIAL RESERVICEMENT DEDEMORPHINE, TO N DOLYченной матрине снова можно будат применить все опновныме зыше отерация и т. д., до тех пор, пока и этот процесс не сборается (см. п. 8, отврияля са, 95, 93). 2. Геомогрански явадовле недависимых переменных а

матрицы U=X-X' означиет следующее. Если наряду с ребрана данного графа Г рассматривать рабра дополнительного графа Г, то на перном же шате нашей процедуры этим ребран будут спотаетствовать паверляка разные переменные --т. с. проплойдет раскраска рабор данного и дополнитехносто трядов в размее цакта. В даранбитем каждое новое вледеare gonuasitestation nepemention aboget nonym pacepacky ptбер, причем 1) ребря, скратненные на каком-то mare по разотр. причем и) реора, сопределяться за каков-то наче по раз-вому, в дальнойсном таким будут соряшения по-ризволяу; 2) разбление вершин на хлассы производится в соответствия развитите нерали на какот изста, исходника на веритим. Количеством ребер нанклого изста, исходника на веритим. Изпостно, далее, что злемент $a_{IJ}[A^{\pm}, A = A(\Gamma), гле \Gamma =$

веориентированный граф без кратения саязей, ратен чиску путей плиты 2, недущих на /-й першины в /-ую. Апалогично, маффициент при х_вх' в многочлене и_{1/}GU=X-X' ранна чисау путей, ведущих из / й вершины в /-ую по ребрам симчала A-ro, a sares 2-ro upera.

8-го, а затем сто циста. 3). Долинейзана процедура приведения графа и наконическому вкду используют приведения списан-ных видые сперацой и матрине, полученией из X (1) вы-ная вымом накоторосо её столбца и соответствующей строки. Если для матрыц порядка k < n-1 призадение к классическому виду определено, то возникает новая возможность для разбиения вершин на калссы: старшей считвется та першина, после вычеркныших которой получается лексикографически старший кановический вод оставшегося графа (см. операции старания мененската от столование и токов разбиение из некотороду шате оборьется. Донамно, что любые две вершаны а п b, откосоные к одному классу при последнем разбления, эканцалентия, т. с. существует ватоморфизм графы перенолящий а в в и сохранноший отношляня сменности.

Растиотным свора такую матрацу Х - Х (Г), что в матрица точкой некоторой матричной алгебры 21 (Г), т. с. соли вально кольно К (например, кольцо цалых чисся Z вли поле рацколальных чисья Q), то множество матрии, полученных подстаналовых ченов QI, то клонет не марие, получения Коспа-повкой в X вместо се переменных заяментов колцо К обра-зуст загебру QIK(Г)=ФЦ (Г)ФК. Алгебра QI(Г) имлется, очевидно, ниванском графа. Некоторые соотношения между

Further results for particular graph classes

Every graph G of tree-width k is definable with 4k + 4 variables and quantifier depth $O(k \log n)$ [Grohe, V. 2006].

Every 3-connected planar graph G is definable with 15 variables and quantifier depth $O(\log n)$ [V. 2007].

Every interval graph G is definable with 15 variables and quantifier depth $O(\log n)$ cf. [Köbler, Kuhnert, Laubner, V. 2011].

Open problem

Is it true that, for each F, if G excludes F as a minor, then G is definable not only with finitely many variables but also with logarithmic quantifier depth?

The speed of stabilization — a worst-case analysis

We have seen that $\operatorname{Stab}_1(P_n) \geq \frac{1}{2}n-1$.

Theorem (Krebs, V. 2015)

There are *n*-vertex graphs *G* and *H* that are distinguishable with 2 variables but only with quantifier depth more than $n - 8\sqrt{n}$. Consequently, there are *n*-vertex graphs *G* with $\operatorname{Stab}_1(G) = (1 - o(1)) n$.

This has some applications...

Universal covers and distributed computing

Theorem (Leighton 82, Immerman and Lander 1990)

The following three conditions are equivalent:

- *G* and *H* are indistinguishable by any 2-variable sentence with counting quantifiers;
- G and H are indistinguishable by Color Refinement.
- G and H have isomorphic universal covers.

- Our result provides *n*-vertex G and H with non-isomorphic universal covers that are isomorphic when truncated at depth (2 o(1))n.
- This solves Norris's problem (1995) and implies that the standard upper bound of 2n for the communication round complexity of a certain class of distributed algorithms is essentially tight.

The speed of stabilization — a worst-case analysis

Theorem (Kiefer, Schweitzer 2016)

For all G,

$$\operatorname{Stab}_2(G) = o(n^2).$$

Specifically, $\operatorname{Stab}_2(G) = O(n^2/\log n)$.

Theorem (Fürer 2001) For each $k \ge 1$, there are G such that

 $\operatorname{Stab}_k(G) = \Omega(n).$

Theorem (Berkholz, Nordström 2016)

If k is sufficiently large, then there are $k\mbox{-}{\rm ary}$ relational structures S such that

$$\operatorname{Stab}_k(S) = n^{\Omega(k/\log k)}.$$

Thank you for your attention!