Weisfeiler-Lemanov algoritam

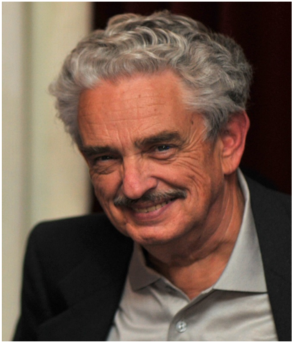
Helena Marciuš

7. listopada 2024.

Weisfeiler-Lemanov algoritam

Weisfeiler, B. Yu.; Leman, A. A. (1968). "A Reduction of a Graph to a Canonical Form and an Algebra Arising during This Reduction". Nauchno-Technicheskaya Informatsia.

- Sovjetski matematičari Boris Weisfeiler (1941 - 1985) i Andrey Aleksandrovich Leman (1940 - 2012)



Weisfeiler-Lemanov algoritam

- Na početku svog članka, Weisfeiler i Leman opisali su algoritam kojim se dobiva tzv. 1-kanonsko označavanje grafa G. Taj se algoritam često naziva jednodimenzionalnim Weisfeiler-Lemanovim algoritmom ili **1-WL**
- U ostatku članka, opisali su algoritam kojim se dobiva baza koherentne algebre generirane grafom G. Taj se algoritam obično naziva dvodimenzionalnim Weifeiler-Lemanovim algoritmom ili **2-WL**
- 2-WL je opisan na algebarski način, a nekoliko godina kasnije dana je i grafovska interpretacija algoritma
- Kasnije je opisana i generalizacija algoritma, tzv. k-WL za $k \geq 2$
- Algoritam se koristi za proučavanje grupe automorfizama grafova, za rješavanje problema izomorfizma grafova te u strojnom učenju

Sadržaj

Glavna literatura

Weisfeiler, B. Yu.; Leman, A. A. (1968). "A Reduction of a Graph to a Canonical Form and an Algebra Arising during This Reduction". Nauchno-Technicheskaya Informatsia.

Weisfeiler, B., On construction and identification of graphs, in: Lecture Notes in Math. 558, 1976.

Babel L., Chuvaeva I.V,, Klin M., Pasechnik D.V., Algebraic combinatorics in mathematical chemistry II. Program implementation of the Weisfeiler–Leman algorithm, Technische Universität München, 1997.

Osnovni pojmovi i oznake

- Graf $G = (V, E)$ - usmjeren, neusmjeren, multigraf, s ili bez petlji, potpun
- Matrica susjedstva grafa G, oznaka $A(G)$
- Matrice I_n, J_n (odnosno I, J ako je n poznat iz konteksta)
- Schurovo množenje matrica, oznaka $\circ$ ($(A \circ B)_{ij} = a_{ij}b_{ij}$)
- Napomena: bavit ćemo se samo jednostavnim neusmjerenim grafovima, no sve se može generalizirati i na usmjerene grafove, multigrafove, ...

Izomorfizam grafova

Definicija 1

Izomorfizam grafova $G_1 = (V_1, E_1)$ i $G_2 = (V_2, E_2)$ je bijekcija $f\colon V_1 \to V_2$ takva da je $(u, v) \in E_1$ ako i samo ako je $(f(u), f(v)) \in E_2$. Ako postoji izomorfizam grafova G_1 i G_2, kažemo da su oni izomorfni i pišemo $G_1 \simeq G_2$.

- Svojstva grafa koja su očuvana pod izomorfizom nazivaju se **invarijante grafa**
- Primjeri invarijanta su broj vrhova, broj bridova, povezanost grafa, bipartitnost grafa, prisutstvo ciklusa duljine 3 (trokuti), kromatski broj, dijametar, spektar,...

Problem izomorfizma grafova

Problem izomorfizma grafova glasi: za zadane grafove G_1 i G_2 odredite jesu li izomorfni.

Ovaj problem zanimljiv je iz perspektive teorije složenosti:

- Pripada klasi NP, no ne zna se je li NP-potpun (pretpostavlja se da nije)
- Ne zna se pripada li klasi P
- Ako nije ni NP-potpun niti ne pripada klasi P, tada pripada klasi NPI[1]
- Kada bi se dokazala pripadnost klasi NPI, za posljedicu bi imali $\mathtt{P} \neq \mathtt{NP}$

[1] NPI problemi su oni koji jesu u klasi NP, no nisu NP-potpuni i nisu u P

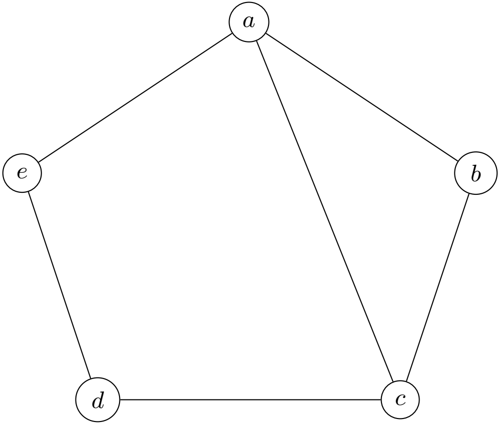
Grupa automorfizama grafa

- Izomorfizam grafa $G = (V, E)$ na samog sebe naziva se **automorfizam grafa**
- Skup svih automorfizama grafa G s kompozicijom čini grupu koju nazivamo **grupa automorfizama grafa** G i označavamo s $Aut(G)$
- Skup $\{x^f : f \in Aut(G)\}$, $x \in V$ nazivamo **orbitom** od x pri djelovanju grupe $Aut(G)$ na V
- Skup $\{((u^f, v^f) \colon f \in Aut(G))\}$, $(u, v) \in V^2$ nazivamo **orbitalom** od (u, v) pri djelovanju grupe $Aut(G)$ na V

1-WL

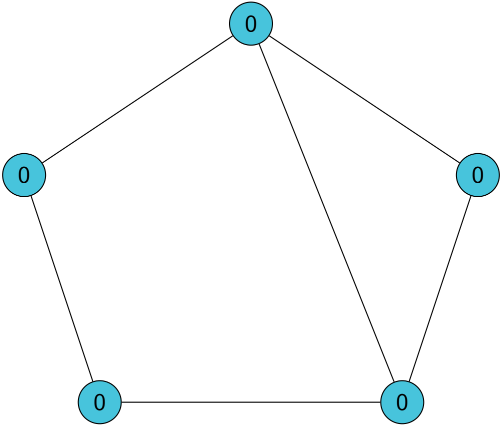
- Neka je $G = (V, E)$ graf.
- Na početku svi vrhovi grafa pripadaju istoj klasi
- Sve dok se particija ne stabilizira:
    - Svakom vrhu $u \in V$ pridruži karakteristični vektor $(k, i_1, \ldots, i_l)$ gdje je k oznaka klase kojoj u pripada, l broj klasa, a i_j je broj susjeda od u koji pripadaju klasi s oznakom k_j
    - Podijeli vrhove u klase tako da istoj klasi pripadaju vrhovi koji imaju iste karakteristične vektore
- Funkcija koja svakom vrhu grafa pridružuje oznaku klase kojoj pripada (tj. boje kojom je obojan) u "stabiliziranoj" particiji naziva se **1-kanonsko označavanje grafa G**
- U literaturi se ovaj algoritam ponekad naziva *colour refeinment* (klase $\approx$ boje)

Primjer



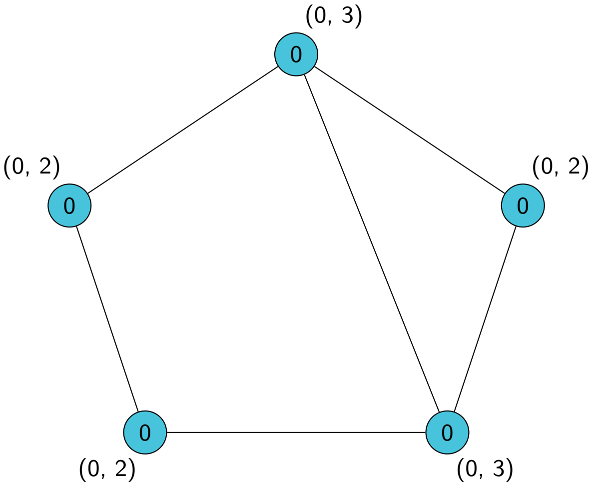
Primjer

Na početku svi vrhovi pripadaju klasi 0



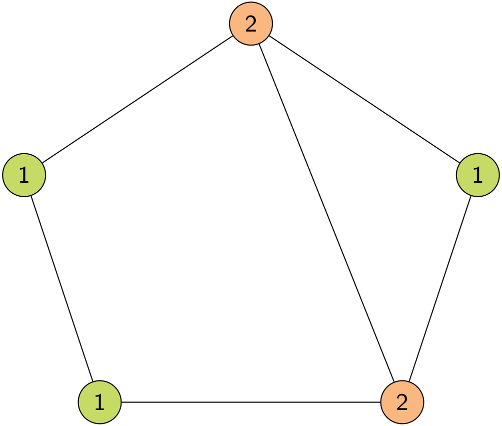
Primjer

Svakom vrhu pridružimo njegov karakteristični vektor



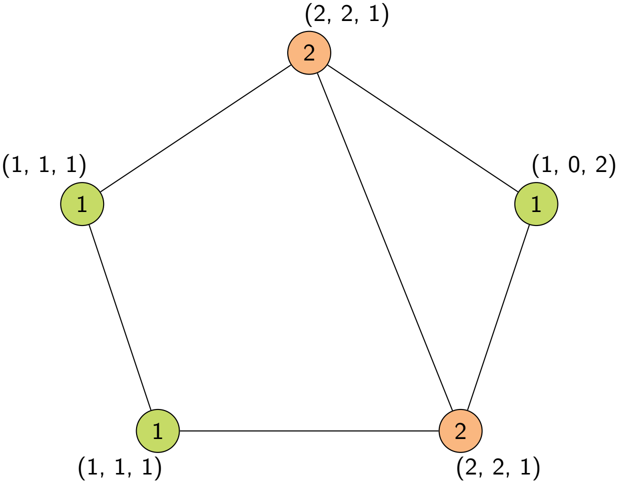
Primjer

Podijelimo vrhove u nove klase obzirom na karakteristične vektore



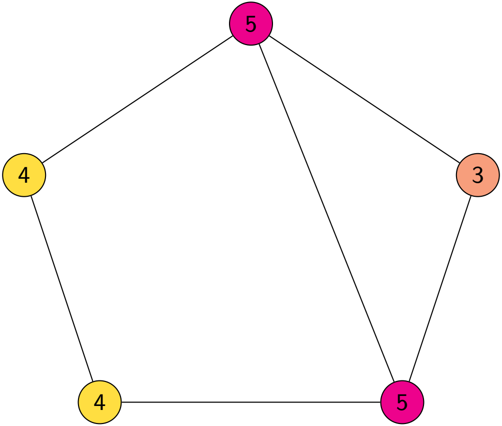
Primjer

Svakom vrhu pridružimo njegov karakteristični vektor



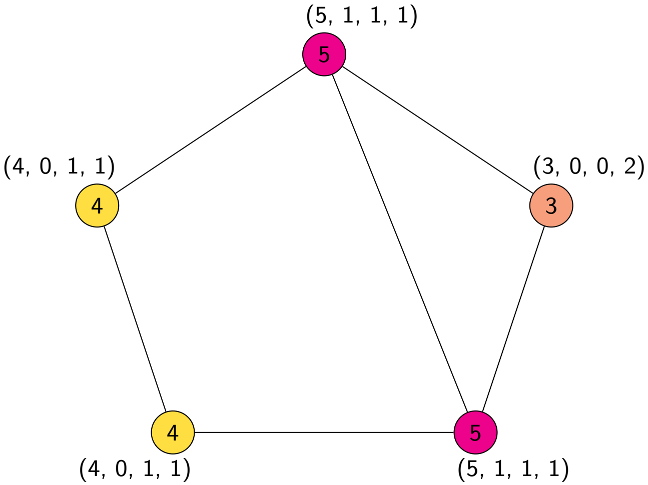
Primjer

Podijelimo vrhove u nove klase obzirom na karakteristične vektore



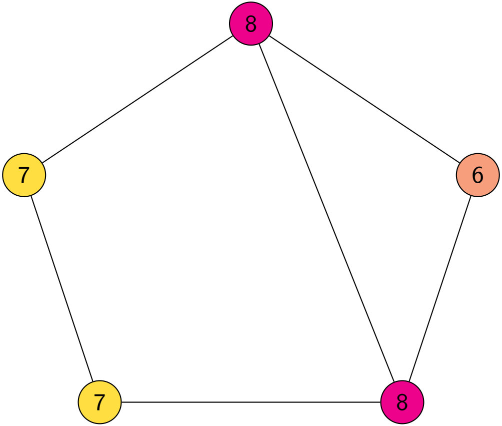
Primjer

Svakom vrhu pridružimo njegov karakteristični vektor



Primjer

Podijelimo vrhove u nove klase obzirom na karakteristične vektore. Primijetimo da smo dobili iste particije kao i u prethodnoj iteraciji!



1-kanonsko označavanje je 8 6 8 7 7

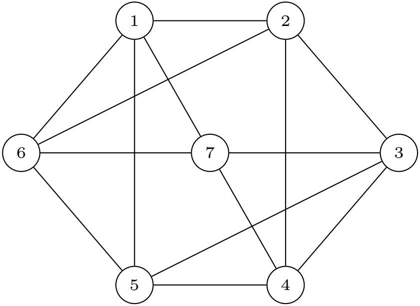
Grupa automorfizama

- U slučaju nekih grafova, kanonsko označavanje dobiveno prethodnim algoritmom reprezentira **orbite grupe automofizama** $Aut(G)$
- Za graf G iz prethodnog primjera, iz kanonskog označavanja možemo iščitati da su orbite $\{a, c\}, \{b\}$ i $\{d, e\}$, tj. $\{1, 3\}$, $\{2\}$ i $\{4, 5\}$

```
gap> LoadPackage("grape");
gap> A := [[0,1,1,0,1], [1,0,1,0,0], [1,1,0,1,0], [0,0,1,0,1], [1,0,0,1,0]];
gap> G := Graph(Group(()), [1..5], OnPoints, function(x,y) return A[x][y]=1;
end, true);
gap> Orbits(AutGroupGraph(G),[1..5]);
[[1,3],[2],[4,5]]
```

Grupa automorfizama

- Međutim, ovo neće uvijek vrijediti za **regularne grafove**
- Naime, algoritam će završiti već nakon prvog koraka pa bismo mogli zaključiti da grupa automorfizama ima jednu orbitu koju čine svi vrhovi grafa
- Na slici vidimo regularan graf čije orbite su $\{1,3,4,6\}$ i $\{2,5,7\}$.



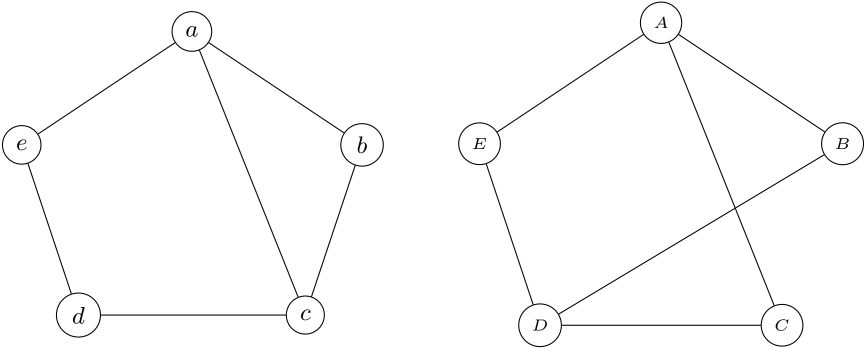

```
gap> LoadPackage("grape");
gap> A := [[0,1,0,0,1,1,1], [1,0,1,1,0,1,0], [0,1,0,1,1,0,1],
[0,1,1,0,1,0,1],[1,0,1,1,0,1,0], [1,1,0,0,1,0,1], [1,0,1,1,0,1,0]];
gap> G := Graph(Group(()), [1..7], OnPoints, function(x,y) return A[x][y]=1;
end, true);
gap> Orbits(AutGroupGraph(G),[1..7]);
[[1,3,4,6],[2,5,7]]
```

Izomorfizam grafova

Kako iskoristiti ovaj algoritam za problem **izomorfizma grafova**?

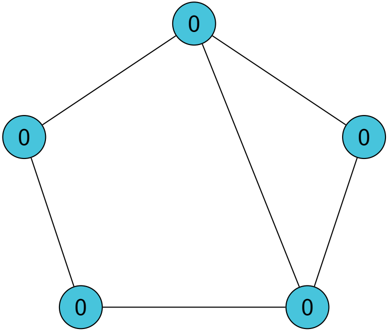
- Algoritam izvršavamo simultano na dva grafa te za svaki graf dobijemo 1-kanonsko označavanje
- Za svaki graf odredimo multiskup $\{k_i : i \in C\}$ gdje je C slika 1-kanonskog označavanja, a k_i je broj vrhova koji pripadaju klasi i.
- Ako se multiskupovi razlikuju, grafovi nisu izomorfni
- Ako su multiskupovi isti, ne možemo ništa zaključiti o (ne)izomorfnosti grafova!

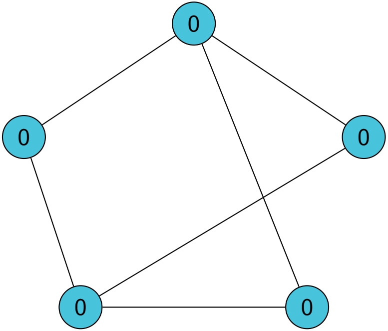
Izomorfizam grafova



Izomorfizam grafova

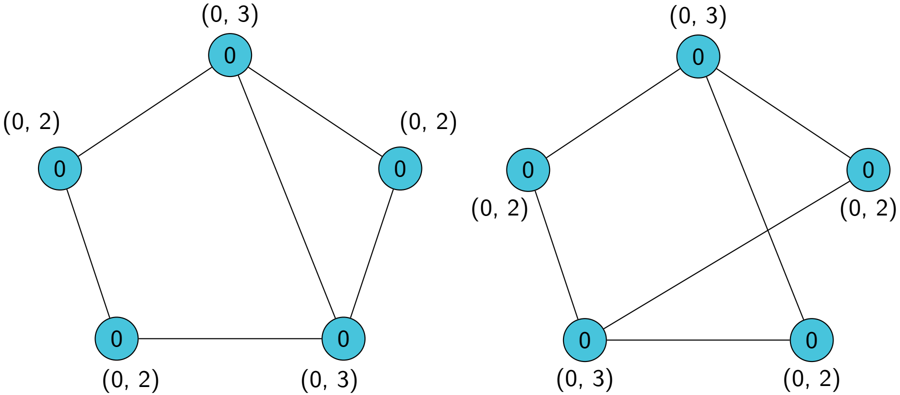
Na početku svi vrhovi pripadaju klasi 0.



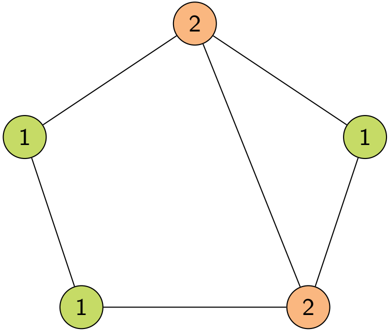


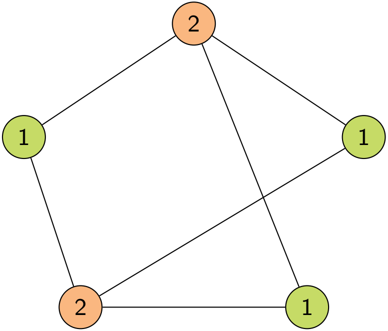
Izomorfizam grafova

Svakom vrhu pridružimo karakteristični vektor.



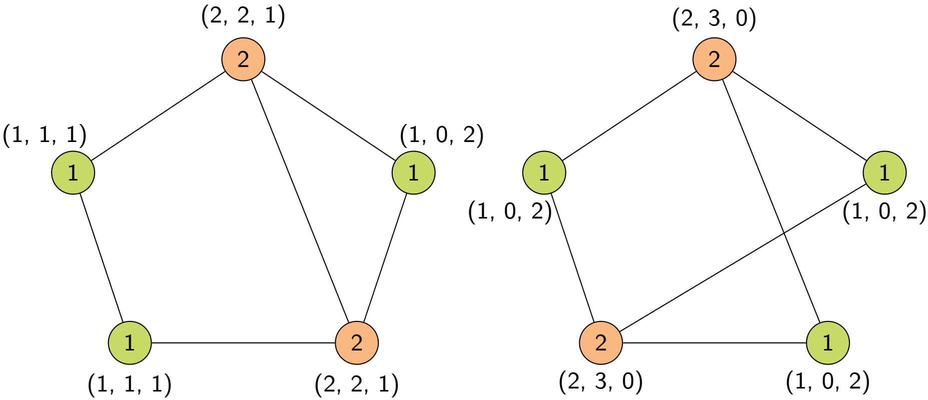
Podijelimo vrhove u klase s obzirom na karakteristične vektore.





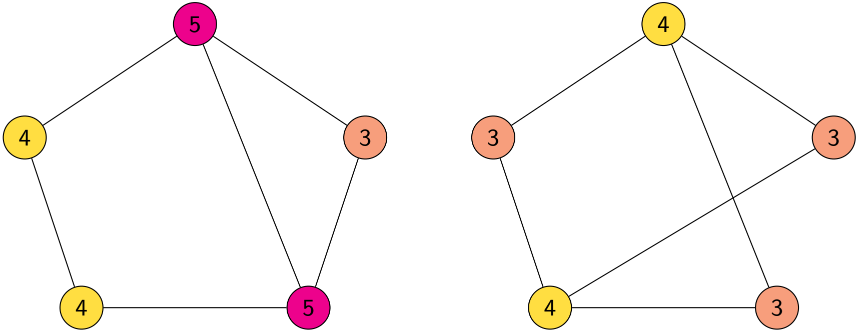
Izomorfizam grafova

Svakom vrhu dodijelimo karakteristični vektor.



Izomorfizam grafova

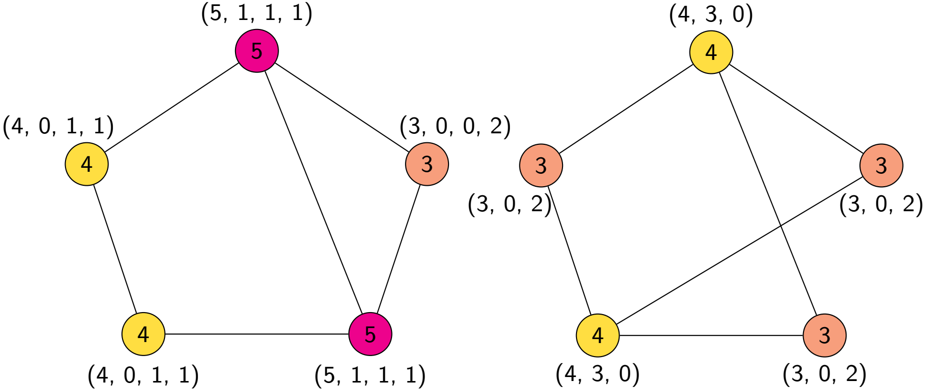
Vrhove podijelimo u klase s obzirom na karakteristične vektore.



Primijetimo da smo u desnom grafu dobili istu particiju kao i u prošlom koraku.
Međutim, u lijevom grafu smo dobili drugačiju particiju pa nastavljamo test.

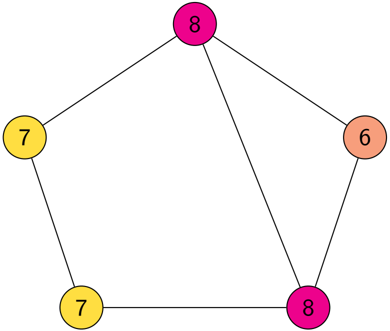
Izomorfizam grafova

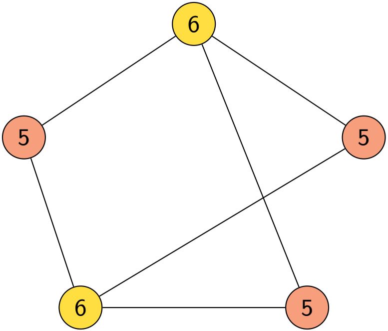
Svakom vrhu dodijelimo karakteristični vektor.



Izomorfizam grafova

Podijelimo vrhove u nove klase s obzirom na karakteristične vektore. Primijetimo da smo na lijevom i desnom grafu dobili istu particiju kao i u prethodnom koraku.



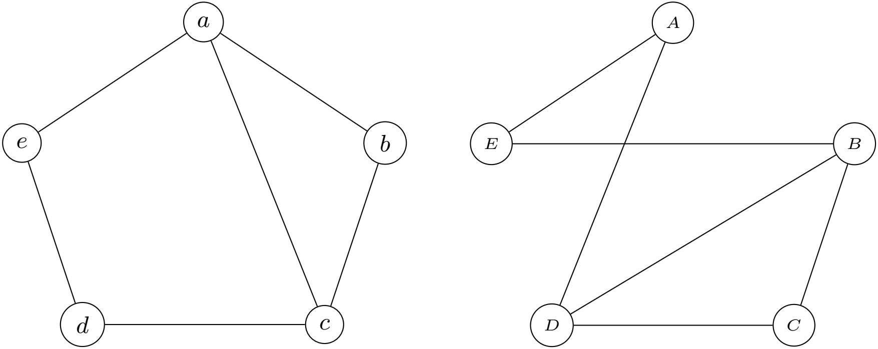


1-kanonsko označavanje je 8 6 8 7 7
Pripadni multiskup je $\{1, 2, 2\}$

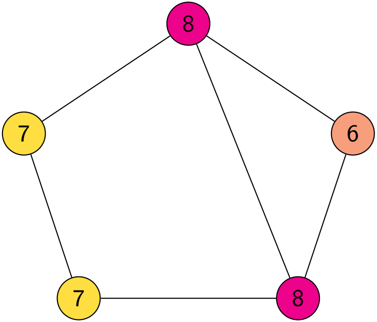
1-kanonsko označavanje je 6 5 5 6 5
Pripadni multiskup je $\{2, 3\}$

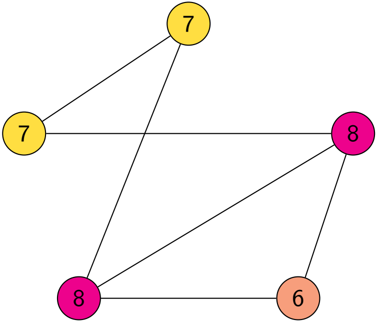
Budući da su multiskupovi različiti, možemo zaključiti da grafovi nisu izomorfni.

Izomorfizam grafova



Izomorfizam grafova





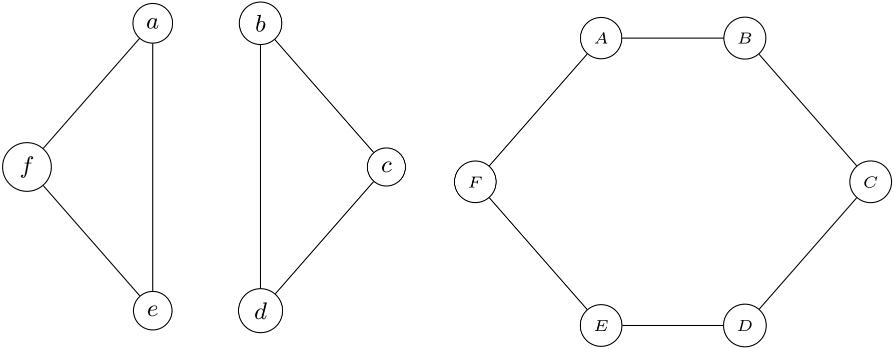
1-kanonsko označavanje je 8 6 8 7 7
Pripadni multiskup je $\{1, 2, 2\}$

1-kanonsko označavanje je 7 8 6 8 7
Pripadni multiskup je $\{1, 2, 2\}$

Vidimo da su multiskupovi isti, no iz toga ne možemo zaključiti da su grafovi izomorfni. Međutim, lako je vidjeti da su grafovi izomorfni!

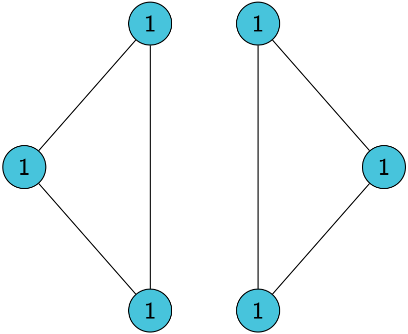
Neizomorfni grafovi s istim 1-kanonskim označavanjem

Svi k-regularni grafovi s istim brojem vrhova imat će isto 1-kanonsko označavanje, no nisu svi međusobno izomorfni!

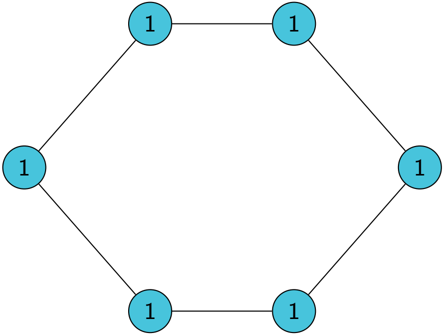


Neizomorfni grafovi s istim 1-kanonskim označavanjem

Svi k-regularni grafovi s istim brojem vrhova imat će isto 1-kanonsko označavanje, no nisu svi međusobno izomorfni!



1-kanonsko označavanje je 1 1 1 1 1 1
Pripadni multiskup je $\{6\}$



1-kanonsko označavanje je 1 1 1 1 1 1
Pripadni multiskup je $\{6\}$

Koherentne algebre

Definicija 2 (Koherentna algebra)

Za potprostor $\mathcal{W} \leq M_n(\mathbb{C})$ kažemo da je **koherentna algebra**[2]ako sadrži I, J, zatvoren je na transponiranje, matrično množenje i Schurovo množenje.

Neka je A $n \times n$ matrica. **Koherentna algebra generirana s** A, u oznaci $\mathcal{W}(A)$, je najmanja koherentna algebra koja sadrži A. Koherentnu algebru generiranu matricom susjedstva grafa G označavat ćemo s $\mathcal{W}(G)$. Koherentnu algebtu generiranu s A nazivamo i **koherentni zatvarač od** A.

- Primjer koherentne algebre je centralizatorska algebra proizvoljne permutacijske grupe $G \leq S_n$ (Centralizatorska algebra je skup svih matrica A koje komutiraju sa svim permutacijskim matricama $P(g), g \in G$.)
- Za koherentnu algebru $\mathcal{W}$ takvu da postoji grupa čija centralizatorska algebra je upravo $\mathcal{W}$ kažemo da je **Schurova**

[2]Weisfeiler i Leman koriste naziv celularna algebra

Baza koherentna algebre

Teorem 3

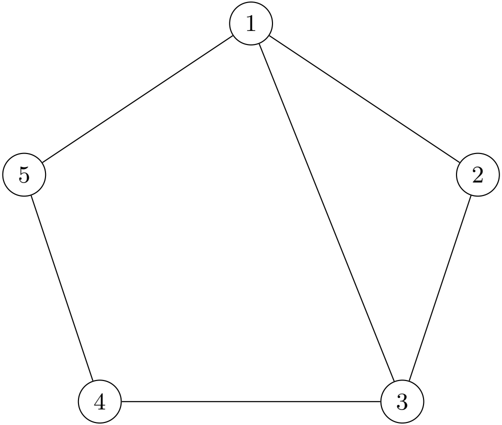
Svaka koherentna algebra $\mathcal{W}$ ima jedinstvenu (do na poredak) bazu $\{A_0, \dots, A_r\}$ sastavljenu od $(0,1)$ matrica.

- Baza $\{A_0, \dots, A_r\}$ koherentne algebre $\mathcal{W}$ ima sljedeća svojstva:
  1. $\sum_{i=0}^{q} A_i = I$ za neki $q \le r-1$
  2. $\sum_{i=0}^{r} A_i = J$
  3. $A_i \circ A_j = \delta_{ij} A_i$
  4. Za svaki $i \in \{0, \dots, r\}$ postoji $j \in \{0, \dots, r\}$ takav da $A_i^t = A_j$
  5. Postoje $p_{ij}^k \in \mathbb{N}$ takvi da je $A_i A_j = \sum_{k=0}^{r} p_{ij}^k A_k$ za sve indekse i, j. Brojeve p_{ij}^k nazivamo **presječni brojevi**.
- Matricu $A(\mathcal{W}) = \sum_{i=0}^{r} i A_i$ nazivamo **matricom susjedstva koherentne algebre $\mathcal{W}$**

Algebarski opis 2-WL algoritma

- Neka je $G = (V, E)$, $A(G)$ matrica susjedstva od G
- Neka je $A_0 = I, A_1 = A(G), A_2 = (J - I - A(G))$ te neka je $X = x_0 A_0 + x_1 A_1 + x_2 A_2$ matrica varijabli
- Neka je r broj različitih varijabli u X (na početku je $r = 3$)
- Sve dok se broj različitih varijabli ne stabilizira:
  - Izračunamo matricu X^2 **uz uvjet da je množenje varijabli nekomutativno**
  - Elementi od X^2 su polinomi u varijablama $x_0, \dots, x_{r-1}$. Neka je s broj različitih polinoma u X^2. Označimo polinome u X^2 sa $y_0, \dots, y_{s-1}$
  - Definiramo matrice A_k, $k = 0, \dots, s-1$ sa $(A_k)_{ij} = 1 \Leftrightarrow X_{ij} = y_k$ i $(A_k)_{ij} = 0$ inače
  - Ako je r jednak s algoritam staje, inače nastavimo sa $r = s$
  - Neka je $X = \sum_{k=0}^{r-1} x_k A_k$ gdje su $x_0, \dots, x_{r-1}$ međusobno različite varijable.
- Matrice $A_0, \dots, A_{r-1}$ čine bazu koherentne algebre $\mathcal{W}(G)$ generirane s $A(G)$, matrica $\sum_{i=0}^{r-1} i A_i$ je matrica susjedstva od $\mathcal{W}(G)$

Primjer



$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} x_0 & x_1 & x_1 & x_2 & x_1 \\ x_1 & x_0 & x_1 & x_2 & x_2 \\ x_1 & x_1 & x_0 & x_1 & x_2 \\ x_2 & x_2 & x_1 & x_0 & x_1 \\ x_1 & x_2 & x_2 & x_1 & x_0 \end{bmatrix}$$

Primjer

Kvadriranjem matrice X dobivamo

$$Y = X^2 = \begin{bmatrix} y_0 & y_2 & y_3 & y_4 & y_5 \\ y_6 & y_1 & y_6 & y_7 & y_7 \\ y_3 & y_2 & y_0 & y_5 & y_4 \\ y_8 & y_7 & y_9 & y_1 & y_{10} \\ y_9 & y_7 & y_8 & y_{10} & y_1 \end{bmatrix}$$

gdje su

$$\begin{aligned} y_0 &= x_0^2 + 3x_1^2 + x_2^2 \\ y_1 &= x_0^2 + 2x_1^2 + 2x_2^2 \\ y_2 &= x_0x_1 + x_1x_0 + x_1^2 + x_1x_2 + x_2^2 \\ y_3 &= x_0x_1 + x_1x_0 + x_1^2 + x_1x_2 + x_2x_1 \\ y_4 &= x_0x_2 + 2x_1^2 + x_1x_2 + x_2x_0 \\ y_5 &= x_0x_1 + x_1x_0 + 2x_1^2 + x_2x_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y_6 &= x_0x_1 + x_1x_0 + x_1^2 + x_2x_1 + x_2^2 \\ y_7 &= x_0x_2 + x_1^2 + x_1x_2 + x_2x_0 + x_2x_1 \\ y_8 &= x_0x_2 + 2x_1^2 + x_2x_0 + x_2x_1 \\ y_9 &= x_0x_1 + x_1x_0 + x_1x_2 + 2x_2x_1 \\ y_{10} &= x_0x_1 + x_1x_0 + x_1x_2 + x_2x_1 + x_2^2 \end{aligned}$$

Vidimo da imamo 11 različitih varijabli što je više nego u prethodnom koraku pa nastavljamo dalje.

Primjer

Kvadriranjem matrice Y dobivamo

$$Z = Y^2 = \begin{bmatrix} z_0 & z_3 & z_4 & z_5 & z_6 \\ z_7 & z_1 & z_7 & z_8 & z_8 \\ z_4 & z_3 & z_0 & z_6 & z_5 \\ z_9 & z_{10} & z_{11} & z_2 & z_{12} \\ z_{11} & z_{10} & z_9 & z_{12} & z_2 \end{bmatrix}$$

gdje su

$$\begin{aligned} z_0 &= y_0^2 + y_2y_6 + y_3^2 + y_4y_8 + y_5y_9 \\ z_1 &= y_1^2 + 2y_6y_2 + 2y_7^2 \\ z_2 &= y_1^2 + y_7^2 + y_8y_4 + y_9y_5 + y_{10}^2 \\ z_3 &= y_0y_2 + y_2y_1 + y_3y_2 + y_4y_7 + y_5y_7 \\ z_4 &= y_0y_3 + y_2y_6 + y_3y_0 + y_4y_9 + y_5y_8 \\ z_5 &= y_0y_4 + y_2y_7 + y_3y_5 + y_4y_{11} + y_5y_{10} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z_6 &= y_0y_5 + y_2y_7 + y_3y_4 + y_4y_{10} + y_5y_1 \\ z_7 &= y_1y_6 + y_6y_0 + y_6y_3 + y_7y_8 + y_7y_9 \\ z_8 &= y_1y_7 + y_6y_4 + y_6y_5 + y_7y_1 + y_7y_{10} \\ z_9 &= y_1y_8 + y_7y_6 + y_8y_0 + y_9y_3 + y_{10}y_9 \\ z_{10} &= y_1y_7 + y_7y_1 + y_8y_2 + y_9y_2 + y_{10}y_7 \\ z_{11} &= y_1y_9 + y_7y_6 + y_8y_3 + y_9y_0 + y_{10}y_8 \\ z_{12} &= y_1y_{10} + y_{10}y_1 + y_7y_7 + y_8y_5 + y_9y_4 \end{aligned}$$

Vidimo da imamo 13 različitih varijabli što je više nego u prethodnom koraku pa nastavljamo dalje.

Primjer

Kvadriranjem matrice Z dobivamo

$$T = Z^2 = \begin{bmatrix} t_0 & t_3 & t_4 & t_5 & t_6 \\ t_7 & t_1 & t_7 & t_8 & t_8 \\ t_4 & t_3 & t_0 & t_6 & t_5 \\ t_9 & t_{10} & t_{11} & t_2 & t_{12} \\ t_{11} & t_{10} & t_9 & t_{12} & t_2 \end{bmatrix}$$

gdje su

$$t_0 = z_0^2 + z_3 z_7 + z_4^2 + z_5 z_9 + z_6 z_{11}$$
$$t_1 = z_1^2 + 2 z_7 z_3 + 2 z_8 z_{10}$$
$$t_2 = z_2^2 + z_9 z_5 + z_{10} z_8 + z_{11} z_6 + z_{12}^2$$
$$t_3 = z_0 z_3 + z_3 z_1 + z_4 z_3 + z_5 z_{10} + z_6 z_{10}$$
$$t_4 = z_0 z_4 + z_3 z_7 + z_4 z_0 + z_5 z_{11} + z_6 z_9$$
$$t_5 = z_0 z_5 + z_3 z_8 + z_4 z_6 + z_5 z_2 + z_6 z_{12}$$

$$t_6 = z_0 z_6 + z_3 z_8 + z_4 z_5 + z_5 z_{12} + z_6 z_2$$
$$t_7 = z_1 z_7 + z_7 z_0 + z_7 z_4 + z_8 z_9 + z_8 z_{11}$$
$$t_8 = z_1 z_8 + z_7 z_5 + z_7 z_6 + z_8 z_{12} + z_8 z_2$$
$$t_9 = z_2 z_9 + z_9 z_0 + z_{10} z_7 + z_{11} z_4 + z_{12} z_{11}$$
$$t_{10} = z_2 z_{10} + z_9 z_3 + z_{10} z_1 + z_{11} z_3 + z_{12} z_{10}$$
$$t_{11} = z_2 z_{11} + z_9 z_4 + z_{10} z_7 + z_{11} z_0 + z_{12} z_9$$
$$t_{12} = z_2 z_{12} + z_9 z_6 + z_{10} z_8 + z_{11} z_5 + z_{12} z_2$$

Vidimo da imamo 13 različitih varijabli, kao i u prethodnom koraku, pa algoritam staje.

Primjer

Definiramo matrice $A_0, \ldots, A_{12}$ sa $(A_k)_{ij} = 1 \iff T_{ij} = t_k$

$$A_0 = \begin{bmatrix}1&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix} A_1 = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix} A_2 = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&0&0&1\end{bmatrix} A_3 = \begin{bmatrix}0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

$$A_4 = \begin{bmatrix}0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix} A_5 = \begin{bmatrix}0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix} A_6 = \begin{bmatrix}0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix} A_7 = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\1&0&1&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

$$A_8 = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\0&0&0&1&1\\1&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix} \qquad A_9 = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\1&0&0&0&0\\0&0&1&0&0\end{bmatrix} \qquad A_{10} = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0\\0&1&0&0&0\end{bmatrix}$$

$$A_{11} = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0\\1&0&0&0&0\end{bmatrix} \qquad A_{12} = \begin{bmatrix}0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\\0&0&0&1&1\end{bmatrix}$$

Matrice $A_0, \ldots, A_{12}$ čine bazu koherentne algebre $\mathcal{W}(G)$ generirane s G

$\displaystyle\sum_{i=0}^{12} iA_i$ je matrica susjedstva od $\mathcal{W}(A)$

Grupa automorfizama

- U slučaju nekih grafova, iz matrice susjedstva X koherentne algebre generirane grafom G možemo iščitati **orbite i orbitale** grupe $Aut(G)$
- Par (i,j) pripada k-toj orbitali akko je $X_{ij} = k$
- Matrica susjedstva koherentne algebre dobivene u prošlom primjeru je

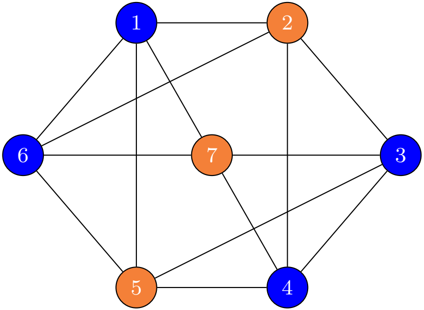
$$\begin{bmatrix} 0 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 7 & 1 & 7 & 8 & 8 \\ 4 & 3 & 0 & 6 & 5 \\ 9 & 10 & 11 & 2 & 12 \\ 11 & 10 & 9 & 12 & 2 \end{bmatrix}$$

- Vidimo da $Aut(G)$ ima orbitale $\{(1,1),(3,3)\}$, $\{(2,2)\}$, $\{(4,4),(5,5)\}$, $\{(1,2),(3,2)\}$, $\{(1,3),(3,1)\}$, $\{(1,4),(3,5)\}$, $\{(1,5),(3,4)\}$, $\{(2,1),(2,3)\}$, $\{(2,4),(2,5)\}$, $\{(4,1),(5,3)\}$, $\{(4,2),(5,2)\}$, $\{(4,3),(5,1)\}$, $\{(4,5),(5,4)\}$

Grupa automorfizama

- Vratimo se na graf za koji nam 1-WL nije dao orbite
- 2-WL daje nam matricu

$$\begin{bmatrix} \color{blue}{0} & 2 & 3 & 3 & 2 & 4 & 2 \\ 5 & \color{orange}{1} & 5 & 5 & 6 & 5 & 6 \\ 3 & 2 & \color{blue}{0} & 4 & 2 & 3 & 2 \\ 3 & 2 & 4 & \color{blue}{0} & 2 & 3 & 2 \\ 5 & 6 & 5 & 5 & \color{orange}{1} & 5 & 6 \\ 4 & 2 & 3 & 3 & 2 & \color{blue}{0} & 2 \\ 5 & 6 & 5 & 5 & 6 & 5 & \color{orange}{1} \end{bmatrix}$$



- Iz dijagonale možemo vidjeti da su orbite $\color{blue}{\{1, 3, 4, 6\}}$ i $\color{orange}{\{2, 5, 7\}}$, a iz ostalih elemenata matrice vidimo orbitale.

Orbitale grupe $Aut(G)$ - protuprimjer

- Weisfeiler i Leman mislili su da 2-WL daje orbitale od $Aut(G)$ za svaki graf G, no kasnije su pronađeni protuprimjeri
- WL algoritam općenito nam neće dati orbitale od $Aut(G)$ ako je G **jako regularan graf**.

Definicija 4

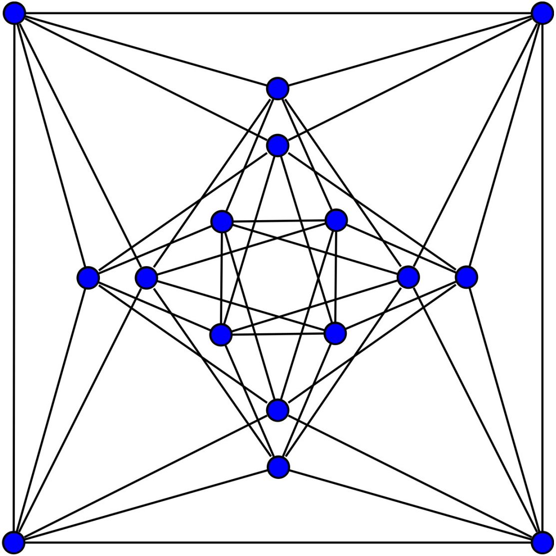
Neka je G jednostavan graf koji nije potpun niti prazan. Kažemo da je G **jako regularan s parametrima** $SRG(n, k, \lambda, \mu)$ ako vrijedi:

1. G je regularan stupnja k,
2. svaka dva susjedna vrha imaju λ zajedničkih susjeda,
3. svaka dva nesusjedna vrha imaju μ zajedničkih susjeda.

- 2-WL završit će već nakon prve iteracije.
- Kao rezultat ćemo dobiti matricu $0 \cdot I + A(G) + 2(J - I - A(G))$ što bi značilo da $Aut(G)$ ima 3 orbitale - jedna sadrži parove oblika (u, u), druga sadrži parove (u, v) koji su bridovi grafa, a treća sadrži parove (u, v) koji nisu bridovi grafa.
- Međutim, postoje jako regularni grafovi za koje ovo ne vrijedi!

Orbitale grupe $Aut(G)$ - protuprimjer

Jedan takav graf je **Shrikhandeov graf** (SRG(16,6,2,2))



Orbitale grupe $Aut(G)$ - protuprimjer

Matrica koja reprezentira orbitale grupe automorfizama Shrikhandeovog grafa izledala bi ovako:

$$\begin{bmatrix}
0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 2 & 3 & 3 & 2 & 2 & 2 \\
1 & 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 1 & 1 & 1 & 3 & 2 & 2 & 3 & 2 & 2 \\
1 & 1 & 0 & 2 & 1 & 3 & 2 & 1 & 3 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 2 \\
1 & 1 & 2 & 0 & 3 & 1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 2 & 3 \\
1 & 2 & 1 & 3 & 0 & 2 & 1 & 3 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 3 \\
1 & 2 & 3 & 1 & 2 & 0 & 1 & 2 & 3 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 3 & 1 \\
1 & 3 & 2 & 2 & 1 & 1 & 0 & 2 & 2 & 1 & 3 & 2 & 2 & 3 & 1 & 1 \\
2 & 1 & 1 & 3 & 3 & 2 & 2 & 0 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 1 & 1 & 3 \\
2 & 1 & 3 & 1 & 2 & 3 & 2 & 2 & 0 & 1 & 1 & 2 & 1 & 2 & 3 & 1 \\
3 & 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 2 & 3 & 3 & 2 & 1 & 1 \\
2 & 3 & 1 & 2 & 1 & 2 & 3 & 2 & 1 & 2 & 0 & 1 & 1 & 3 & 2 & 1 \\
3 & 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & 2 & 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 3 & 1 & 2 & 1 \\
3 & 2 & 2 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 1 & 3 & 1 & 3 & 0 & 1 & 1 & 2 \\
2 & 3 & 2 & 1 & 2 & 1 & 3 & 1 & 2 & 2 & 3 & 1 & 1 & 0 & 1 & 2 \\
2 & 2 & 3 & 2 & 1 & 3 & 1 & 1 & 3 & 1 & 2 & 2 & 1 & 1 & 0 & 2 \\
2 & 2 & 2 & 3 & 3 & 1 & 1 & 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 & 0
\end{bmatrix}$$

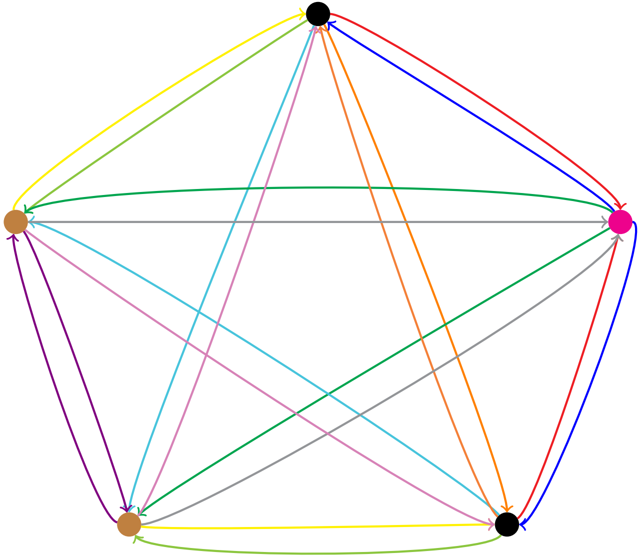
Općenito, možemo biti sigurni da će nam 2-WL dati orbitale samo ako je pripadna koherentna algebra Schurova!

Koherentna algebra i bojanje potpunog grafa

- Pogledajmo sada matricu susjedstva X koherentne algebre $\mathcal{W} \leq M_n(\mathbb{C})$
- Vrijednosti matrice možemo interpretirati kao boje vrhova i bridova **usmjerenog potpunog grafa K_n**
- Brid (i, j) obojan je bojom k ako i samo ako je $X_{ij} = k$ za $i \neq j$
- Vrh i obojan je bojom l ako i samo ako je $X_{ii} = l$
- Dakle, koherentnu algebru možemo reprezentirati obojenim usmjerenim potpunim grafom.

Primjer

Koherentnu algebru iz prethodnog primjera možemo prikazati sljedećim obojanim grafom



Koherentna algebra i bojanje potpunog grafa

Imamo sljedeći teorem:

Teorem 5

Svaka koherentna algebra $\mathcal{W} \leq M_n(\mathbb{C})$ izomorfna je potpunom usmjerenom grafu $K_n = (V, E)$ čiji bridovi su obojani sa r boja. Vrijedi:

1) *postoji particija $\{U_1, \ldots, U_k\}$ od V takva da je svaki G_α (podgraf od K_n čiji su svi bridovi obojani bojom α) sadržan u nekom $U_i \times U_j$. Svaki vrh $u \in U_i$ ima $d_{out}(\alpha)$ bridova u boji α koji izlaze iz u, a svaki vrh $v \in U_j$ ima $d_{in}(\alpha)$ bridova u boji α koji ulaze u v. Prezciznije, $d_{out}(\alpha)|U_i| = d_{in}|U_j|$.*
2) *Svaki G_α je ili simetričan ili antisimetričan. Za svaki antisimetričan G_α postoji boja α_1 takva da $G_\alpha^t = G_{\alpha_1}$.*
3) *Neka su α, β, γ proizvoljne, ne nužno različite boje. Pretpostavimo da je brid (i, k) obojan bojom γ. Tada postoji $n(\alpha, \beta, \gamma)$ trokuta obojanog u boje α, β, γ s bazom (i, k).*

Grafovska interpretacija 2-WL algoritma

- Neka je $G = (V, E)$ graf te $\overline{G} = (V, \overline{E})$ njegov komplement. Na početku imamo tri boje: $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$. Svakom uređenom paru vrhova dodijeljujemo boju na sljedeći način:

$$c((u,v)) \begin{cases} \alpha_0, & \text{ako } u = v \\ \alpha_1, & \text{ako } (u,v) \in E \\ \alpha_2, & \text{ako } (u,v) \in \overline{E} \end{cases}$$

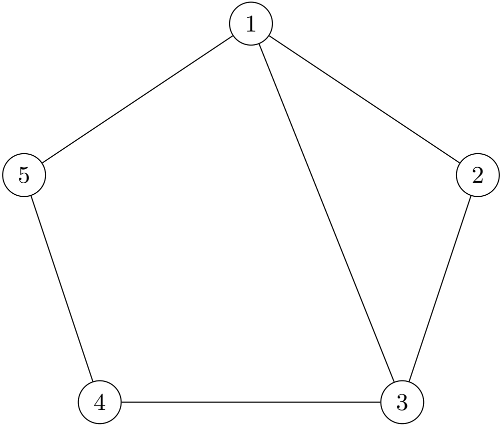
- Neformalno, vrhove smo obojali bojom α_0, bridove od G bojom α_1, a bridove od $\overline{G}$ bojom α_2.
- Sve dok se bojanje usmjerenog grafa K_n ne stabilizira:
    - Za svaki uređeni par vrhova $e = (u, v)$ odredi skup

    $$L(e) = \{(\alpha_i, \alpha_j, p_{ij}^e) : \alpha_i, \alpha_j \in C, p_{i,j}^e \neq 0\}$$

    gdje je p_{ij}^e broj puteva duljine 2 u $G \cup \overline{G}$ od vrha u do vrha v takvih da je prvi brid na tom putu obojan bojom α_i, a drugi brid je obojan bojom α_j.
    - Uređenim parovima vrhova dodijelimo boje tako da svi parovi e sa jednakim skupom $L(e)$ imaju istu boju
- Funkcija koja svakom uređenom paru pridružuje boju naziva se **2-kanonsko označavanje**

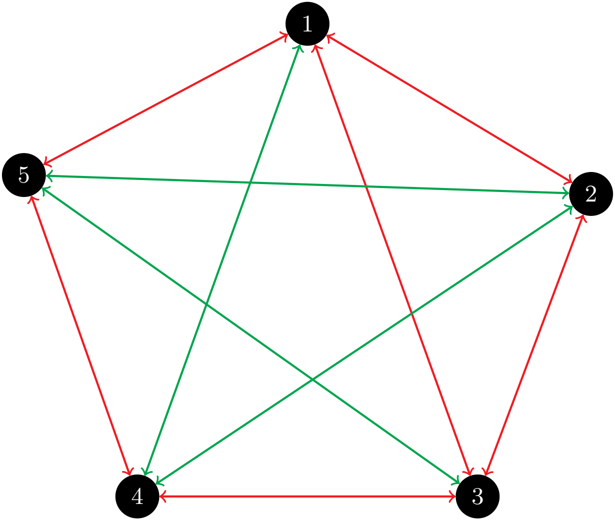
Primjer

Pogledajmo primjer algoritma na grafu G.



Primjer

Uređenim parovima vrhova dodijelimo pripadne boje.



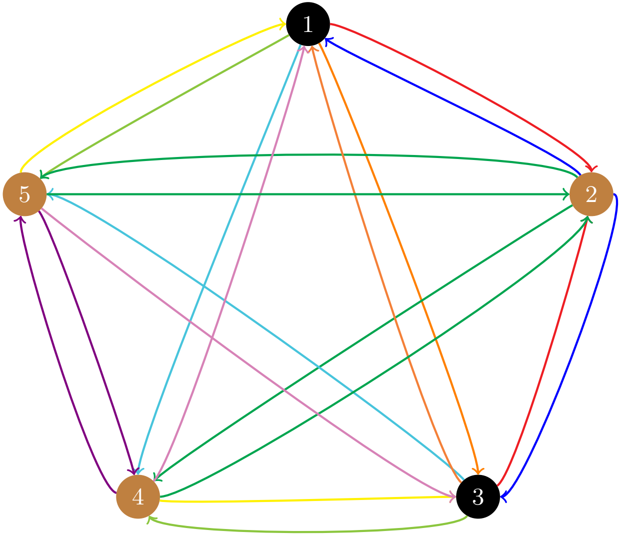
Primjer

Za svaki uređeni par vrhova e odredimo skup $L(e)$.

$$L\big((1,1)\big) = L\big((3,3)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_0,1),(\alpha_1,\alpha_1,3),(\alpha_2,\alpha_2,1)\}$$
$$L\big((2,2)\big) = L\big((4,4)\big) = L\big((5,5)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_0,1),(\alpha_1,\alpha_1,2),(\alpha_2,\alpha_2,2)\}$$
$$L\big((1,2)\big) = L\big((3,2)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_0,1),(\alpha_1,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_2,1),(\alpha_2,\alpha_2,1)\}$$
$$L\big((1,3)\big) = L\big((3,1)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_0,1),(\alpha_1,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_2,1),(\alpha_2,\alpha_1,1)\}$$
$$L\big((1,4)\big) = L\big((3,5)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_2,1),(\alpha_1,\alpha_1,2),(\alpha_1,\alpha_2,1),(\alpha_2,\alpha_0,1)\}$$
$$L\big((1,5)\big) = L\big((3,4)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha,1),(\alpha_1,\alpha_2,2),(\alpha_2,\alpha_1,1)\}$$
$$L\big((2,1)\big) = L\big((2,3)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_0,1),(\alpha_1,\alpha_1,1),(\alpha_2,\alpha_1,1),(\alpha_2,\alpha_2,1)\}$$
$$L\big((2,4)\big) = L\big((2,5)\big) = L\big((4,2)\big) = L\big((5,2)\big) =$$
$$= \{(\alpha_0,\alpha_2,1),(\alpha_1,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_2,1),(\alpha_2,\alpha_0,1),(\alpha_2,\alpha_1,1)\}$$
$$L\big((4,1)\big) = L\big((5,3)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_2,1),(\alpha_1,\alpha_1,2),(\alpha_2,\alpha_0,1),(\alpha_2,\alpha_1,1)\}$$
$$L\big((4,3)\big) = L\big((5,1)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_0,1),(\alpha_1,\alpha_2,1),(\alpha_2,\alpha_1,2)\}$$
$$L\big((4,5)\big) = L\big((5,4)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_1,1),(\alpha_1,\alpha_0,1),(\alpha_1,\alpha_2,1),(\alpha_2,\alpha_1,1),(\alpha_2,\alpha_2,1)\}$$

Primjer

Uređenim parovima vrhova dodijelimo tako da svi parovi e sa jednakim skupom $L(e)$ imaju istu boju.



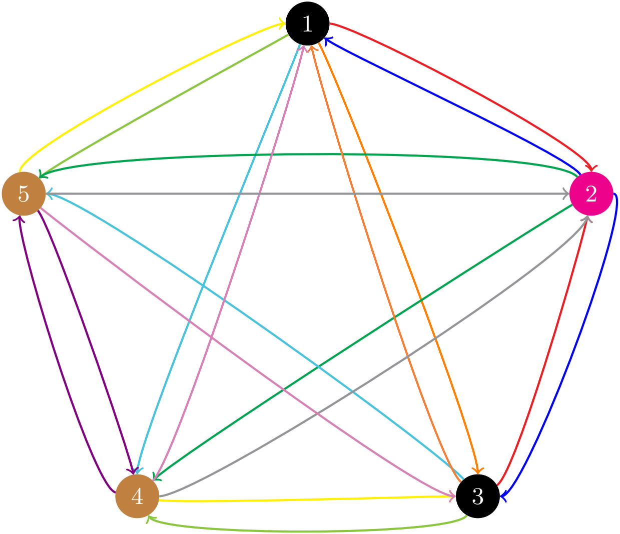
Primjer

Za svaki uređeni par vrhova e odredimo skup $L(e)$.

$$L\big((1,1)\big) = L\big((3,3)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_0, 1), (\alpha_2, \alpha_6, 1), (\alpha_3, \alpha_3, 1), (\alpha_4, \alpha_8, 1), (\alpha_5, \alpha_9, 1)\}$$
$$L\big((2,2)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_1, 1), (\alpha_6, \alpha_2, 2), (\alpha_7, \alpha_7, 2)\}$$
$$L\big((4,4)\big) = L\big((5,5)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_1, 1), (\alpha_7, \alpha_7, 1), (\alpha_8, \alpha_4, 1), (\alpha_9, \alpha_5, 1), (\alpha_{10}, \alpha_{10}, 1)\}$$
$$L\big((1,2)\big) = L\big((3,2)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_2, 1), (\alpha_2, \alpha_0, 1), (\alpha_3, \alpha_2, 1), (\alpha_4, \alpha_7, 1), (\alpha_5, \alpha_7, 1)\}$$
$$L\big((1,3)\big) = L\big((3,1)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_3, 1), (\alpha_2, \alpha_6, 1), (\alpha_3, \alpha_0, 1), (\alpha_4, \alpha_9, 1), (\alpha_5, \alpha_8, 1)\}$$
$$L\big((1,4)\big) = L\big((3,5)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_4, 1), (\alpha_2, \alpha_7, 1), (\alpha_3, \alpha_5, 1), (\alpha_4, \alpha_1, 1), (\alpha_5, \alpha_{10}, 1)\}$$
$$L\big((1,5)\big) = L\big((3,4)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_5, 1), (\alpha_2, \alpha_7, 1), (\alpha_3, \alpha_4, 1), (\alpha_4, \alpha_{10}, 1), (\alpha_5, \alpha_1, 1)\}$$
$$L\big((2,1)\big) = L\big((2,3)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_6, 1), (\alpha_6, \alpha_0, 1), (\alpha_6, \alpha_3, 1), (\alpha_7, \alpha_8, 1), (\alpha_7, \alpha_9, 1)\}$$
$$L\big((2,4)\big) = L\big((2,5)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_7, 1), (\alpha_6, \alpha_4, 1), (\alpha_6, \alpha_5, 1), (\alpha_7, \alpha_1, 1), (\alpha_7, \alpha_{10}, 1)\}$$
$$L\big((4,1)\big) = L\big((5,3)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_8, 1), (\alpha_7, \alpha_6, 1), (\alpha_8, \alpha_0, 1), (\alpha_9, \alpha_3, 1), (\alpha_{10}, \alpha_9, 1)\}$$
$$L\big((4,2)\big) = L\big((5,3)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_7, 1), (\alpha_7, \alpha_1, 1), (\alpha_8, \alpha_2, 1), (\alpha_9, \alpha_2, 1), (\alpha_{10}, \alpha_7, 1)\}$$
$$L\big((4,3)\big) = L\big((5,1)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_9, 1), (\alpha_7, \alpha_6, 1), (\alpha_8, \alpha_3, 1), (\alpha_9, \alpha_0, 1), (\alpha_{10}, \alpha_8, 1)\}$$
$$L\big((4,5)\big) = L\big((5,4)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_{10}, 1), (\alpha_7, \alpha_7, 1), (\alpha_8, \alpha_5, 1), (\alpha_9, \alpha_4, 1), (\alpha_{10}, \alpha_1, 1)\}$$

Primjer

Uređenim parovima vrhova dodijelimo tako da svi parovi e sa jednakim skupom $L(e)$ imaju istu boju.



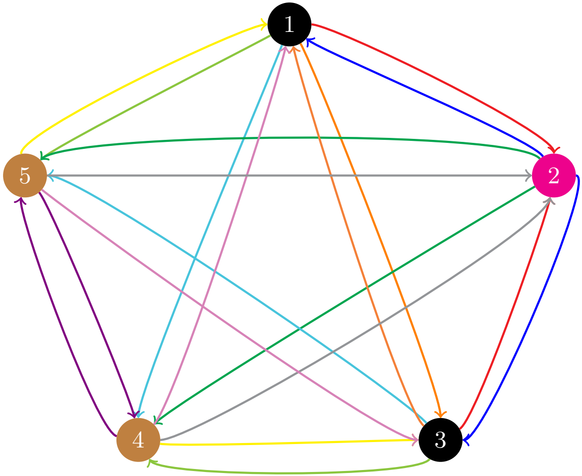
Primjer

Za svaki uređeni par vrhova e odredimo skup $L(e)$.

$$L\big((1,1)\big) = L\big((3,3)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_0, 1), (\alpha_3, \alpha_7, 1), (\alpha_4, \alpha_4, 1), (\alpha_5, \alpha_9, 1), (\alpha_6, \alpha_{11}, 1)\}$$
$$L\big((2,2)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_1, 1), (\alpha_7, \alpha_3, 2), (\alpha_8, \alpha_{10}, 2)\}$$
$$L\big((4,4)\big) = L\big((5,5)\big) = \{(\alpha_2, \alpha_2, 1), (\alpha_9, \alpha_5, 1), (\alpha_{10}, \alpha_8, 1), (\alpha_{11}, \alpha_6, 1), (\alpha_{12}, \alpha_{12}, 1)\}$$
$$L\big((1,2)\big) = L\big((3,2)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_3, 1), (\alpha_3, \alpha_1, 1), (\alpha_4, \alpha_3, 1), (\alpha_5, \alpha_{10}, 1), (\alpha_6, \alpha_{10}, 1)\}$$
$$L\big((1,3)\big) = L\big((3,1)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_4, 1), (\alpha_3, \alpha_7, 1), (\alpha_4, \alpha_0, 1), (\alpha_5, \alpha_{11}, 1), (\alpha_6, \alpha_9, 1)\}$$
$$L\big((1,4)\big) = L\big((3,5)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_5, 1), (\alpha_3, \alpha_8, 1), (\alpha_4, \alpha_6, 1), (\alpha_5, \alpha_2, 1), (\alpha_6, \alpha_{12}, 1)\}$$
$$L\big((1,5)\big) = L\big((3,4)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_6, 1), (\alpha_3, \alpha_8, 1), (\alpha_4, \alpha_5, 1), (\alpha_5, \alpha_{12}, 1), (\alpha_6, \alpha_2, 1)\}$$
$$L\big((2,1)\big) = L\big((2,3)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_7, 1), (\alpha_7, \alpha_0, 1), (\alpha_7, \alpha_4, 1), (\alpha_8, \alpha_{11}, 1), (\alpha_7, \alpha_9, 1)\}$$
$$L\big((2,4)\big) = L\big((2,5)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_8, 1), (\alpha_7, \alpha_5, 1), (\alpha_7, \alpha_6, 1), (\alpha_8, \alpha_2, 1), (\alpha_8, \alpha_{12}, 1)\}$$
$$L\big((4,1)\big) = L\big((5,3)\big) = \{(\alpha_2, \alpha_9, 1), (\alpha_9, \alpha_0, 1), (\alpha_{10}, \alpha_7, 1), (\alpha_{11}, \alpha_4, 1), (\alpha_{12}, \alpha_{11}, 1)\}$$
$$L\big((4,2)\big) = L\big((5,2)\big) = \{(\alpha_2, \alpha_{10}, 1), (\alpha_8, \alpha_3, 1), (\alpha_{10}, \alpha_0, 1), (\alpha_{11}, \alpha_3, 1), (\alpha_{12}, \alpha_{10}, 1)\}$$
$$L\big((4,3)\big) = L\big((5,1)\big) = \{(\alpha_2, \alpha_{11}, 1), (\alpha_9, \alpha_4, 1), (\alpha_{10}, \alpha_7, 1), (\alpha_{11}, \alpha_0, 1), (\alpha_{12}, \alpha_9, 1)\}$$
$$L\big((4,5)\big) = L\big((5,4)\big) = \{(\alpha_2, \alpha_{12}, 1), (\alpha_9, \alpha_6, 1), (\alpha_{10}, \alpha_8, 1), (\alpha_{11}, \alpha_5, 1), (\alpha_{12}, \alpha_2, 1)\}$$

Primjer

Obojamo uređene parove vrhova tako da svi parovi e sa jednakim skupom $L(e)$ imaju istu boju.



Vidimo da smo dobili isto bojanje kao i u prethodnoj iteraciji!

Presječni brojevi

- Iz bojanja potpunog usmjerenog grafa i skupova $L(e)$ iz zadnje iteracije možemo pročitati **presječne brojeve** pripadne koherentne algebre.
- Primjerice, parovi $(1,1)$ i $(3,3)$ obojani su bojom α_0 te je

$$L\big((1,1)\big) = L\big((3,3)\big) = \{(\alpha_0, \alpha_0, 1), (\alpha_3, \alpha_7, 1), (\alpha_4, \alpha_4, 1), (\alpha_5, \alpha_9, 1), (\alpha_6, \alpha_{11}, 1)\}$$

Imamo $p^0_{0,0} = p^0_{3,7} = p^0_{4,4} = p^0_{5,9} = p^0_{6,11} = 1$, a ostali presječni brojevi p^0_{ij} su 0

- Par $(2,2)$ obojan je bojom α_1 te je

$$L\big((2,2)\big) = \{(\alpha_1, \alpha_1, 1), (\alpha_7, \alpha_3, 2), (\alpha_8, \alpha_{10}, 2)\}$$

Imamo $p^1_{1,1} = 1$, $p^1_{7,3} = p^1_{8,10} = 2$, a ostali presječni brojevi p^1_{ij} su 0

Nehomogena koherentna konfiguracija

- Neka je $G = (V, E)$ graf te pretpostavimo da smo 2-WL algoritmom dobili bojanje usmjerenog grafa $K_{|V|}$ bojama $0, \ldots, r$.
- Neka je G_i graf sa skupom vrhova V te bridovima koji su obojani bojom i, $i = 0, \ldots r$
- Grafovi $G_0, \ldots, G_r$ čine strukturu koja podsjeća na **koherentnu konfiguraciju**

Definicija 6

Koherentna konfiguracija s r klasa sastoji se od usmjerenih grafova $G_0, \ldots, G_r$ sa zajedničkim $n-$članim skupom vrhova V takvih da vrijedi:

(1) G_0 je graf koji sadrži sve petlje i nema drugih bridova

(2) $G_1, \ldots, G_r$ čine particiju potpunog grafa K_n

(3) Za svaki indeks i postoji i' takav da je $G_i^t = G_{i'}$

(4) Za svaki brid (x, y) u G_k, broj vrhova z takvih da je (x, z) brid u G_i, a (z, y) brid u G_j ovisi samo o indeksima i, j, k. Označavamo ga p_{ij}^k i zovemo presječnim brojem konfiguracije.

Nehomogena koherentna konfiguracija

- Neka je $G = (V, E)$ graf te pretpostavimo da smo 2-WL algoritmom dobili bojanje usmjerenog grafa $K_{|V|}$ bojama $0, \dots, r$.
- Neka je G_i graf sa skupom vrhova V te bridovima koji su obojani bojom i, $i = 0, \dots r$
- Grafovi $G_0, \dots, G_r$ čine strukturu koja podsjeća na **koherentnu konfiguraciju**

Definicija 6

Koherentna konfiguracija s r klasa sastoji se od usmjerenih grafova $G_0, \dots, G_r$ sa zajedničkim $n-$članim skupom vrhova V takvih da vrijedi:

(1) ~~G_0 je~~ Postoji $0 \leq s \leq r-1$ takav da je $\cup_{i=0}^{s} G_i$ graf koji sadrži sve petlje i nema drugih bridova

(2) ~~G_1~~ $G_s, \dots, G_r$ čine particiju potpunog grafa K_n

(3) Za svaki indeks i postoji i' takav da je $G_i^t = G_{i'}$

(4) Za svaki brid (x, y) u G_k, broj vrhova z takvih da je (x, z) brid u G_i, a (z, y) brid u G_j ovisi samo o indeksima i, j, k. Označavamo ga p_{ij}^k i zovemo presječnim brojem konfiguracije.

Opis puteva u grafu

- Ako usporedimo skup $L(i,j)$ iz k-te iteracije grafovskog 2-WL algoritma te polinom na poziciji i,j u matrici X^2 iz k-te iteracije algebarskog 2-WL algoritma, vidimo da polinomi iz X^2 opisuju sve puteve duljine 2 od vrha i do vrha j u obojanom usmjerenom potpunom grafu K_n
- Primjerice, u zadnjoj iteraciji imamo

$$L\big((1,2)\big) = \{(\alpha_0,\alpha_3,1),(\alpha_3,\alpha_1,1),(\alpha_4,\alpha_3,1),(\alpha_5,\alpha_{10},1),(\alpha_6,\alpha_{10},1)\}$$

$$(X^2)_{1,2} = x_0x_3 + x_3x_1 + x_4x_3 + x_5x_{10} + x_6x_{10}$$

što opisuje puteve duljine 2 koji počinju u 0 i završavaju u 1:

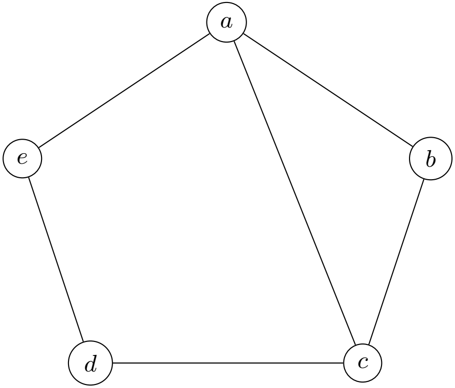
  - jedan put čiji prvi brid je obojan s α_0, a drugi brid s α_3
  - jedan put čiji prvi brid je obojan s α_3, a drugi brid s α_1
  - jedan put čiji prvi brid je obojan s α_4, a drugi brid s α_3
  - jedan put čiji prvi brid je obojan s α_5, a drugi brid s α_{10}
  - jedan put čiji prvi brid je obojan s α_6, a drugi brid s α_{10}

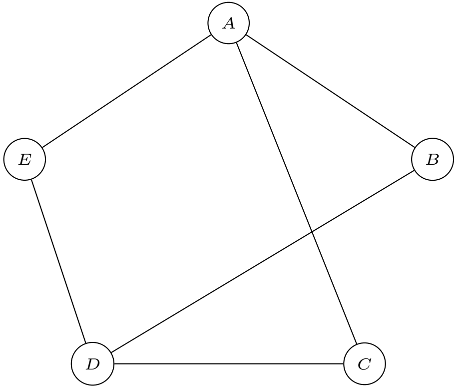
2-WL i izomorfizam grafova

- 2-WL može se iskoristiti za provjeru neizomorfnosti grafova na sličan način kao i 1-WL
- Neka je $C = \{0, \ldots, s-1\}$ skup boja kojima su obojani uređeni parovi $e \in V^2$ grafa $G = (V, E)$
- Možemo definirati multiskup $\{c_i : i \in C\}$ gdje je c_i broj uređenih parova obojanih bojom i
- Da bismo provjerili (ne)izomorfnost grafova G_1 i G_2, moramo odrediti 2-kanonska označavanja svakog grafa te pripadne multiskupove
- Ako se multiskupovi razlikuju, grafovi nisu izomorfni
- Ako su multiskupovi isti, ne možemo ništa zaključiti o (ne)izomorfnosti grafova!

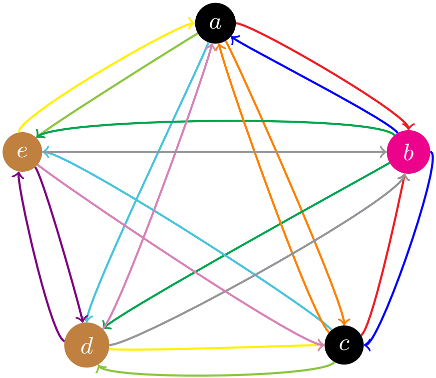
2-WL i izomorfizam grafova

Odredimo 2-kanonska označavanja grafova sa slike

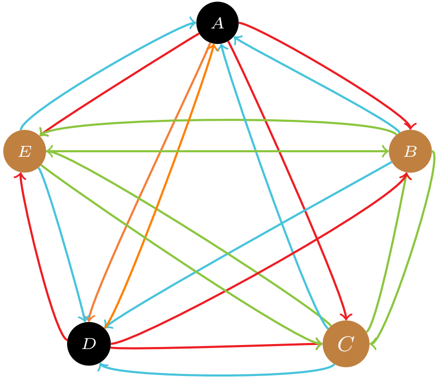




2-WL i izomorfizam grafova



2-kanonsko označavanje je
0 3 4 5 6 7 1 7 8 8 4 3 0 6 5 9 10 11 2 12 11 10 9 12 2
Pripadni multiskup je
$\{2, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2\}$

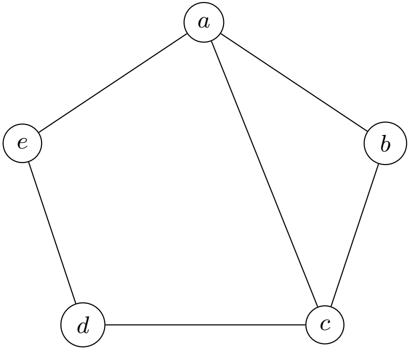


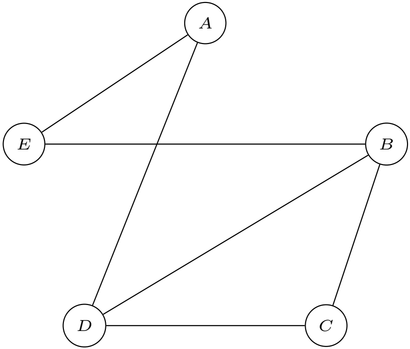
2-kanonsko označavanje je
0 2 2 3 2 4 1 5 4 5 4 5 1 4 5 3 2 2 0 3 4 5 5 4 1
Pripadni multiskup je $\{2, 3, 6, 2, 6, 6\}$

Vidimo da se multiskupovi razlikuju pa možemo zaključiti da grafovi nisu izomorfni.

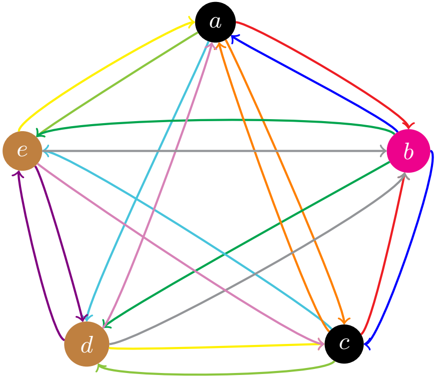
2-WL i izomorfizam grafova

Odredimo 2-kanonsko označavanje grafova sa slike

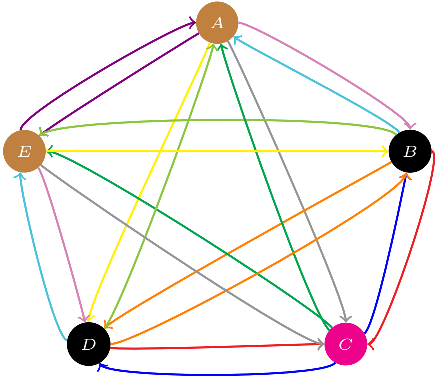




2-WL i izomorfizam grafova



2-kanonsko označavanje je
0 3 4 5 6 7 1 7 8 8 4 3 0 6 5 9 10 11 2
12 11 10 9 12 2
Pripadni multiskup je
$\{2, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2\}$

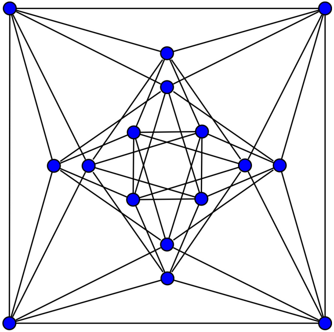


2-kanonsko označavanje je
2 9 10 11 12 5 0 3 4 6 8 7 1 7 8 6 4 3 0
5 12 11 10 9 2
Pripadni multiskup je
$\{2, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2\}$

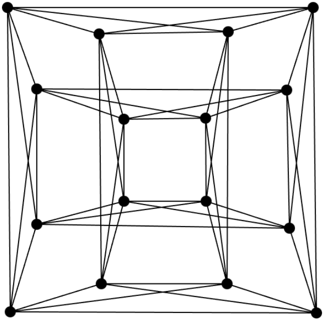
Multiskupovi su isti, no lako je vidjeti da su grafovi izomorfni.

2-WL i izomorfizam grafova

- Bilo koja dva jako regularna grafa s istim brojem vrhova i bridova imaju jednako 2-kanonsko označavanje
- Međutim, postoje jako regularni grafovi s istim parametrima koji nisu međusobno izomorfni!
- Primjeri takvih grafova su **Shrikhandeov graf** i **topovski graf** (oba imaju parametre $SRG(16, 6, 2, 2)$)



Slika: Shrikhandeov graf



Slika: Topovski graf

k-WL, $k \geq 2$

- 2-WL možemo generalizirati na k-WL za $k \geq 2$
- Umjesto uređenih parova gledamo uređene k-torke te za svaku k-torku e računamo skup $L^k(e) = \{(c^k, p^{c^k}_{v^k}) \colon p^{c^k}_{v^k} \neq 0\}$ gdje je

$$p^{c^k}_{v^k} = |\{w \in V \colon \forall i \in \{1, \dots k-1\}\ c(v_i, w) = c_i \text{ i } c(w, v_k) = c_k\}|$$

- Dobivamo k-kanonsko označavanje koje se može koristit za provjeru (ne)izomorfnosti grafova
- Međutim, ne postoji k za koji bi k-WL u potpunosti riješio problem izomorfizma grafova

Teorem 7 (Cai, Fürer, Immerman, 1992)

Za svaki k postoje neizomorfni 3-regularni grafovi G_k i H_k s $O(k)$ vrhova koj imaju isto k-kanonsko označavanje.

Hvala na pažnji ☺

Literatura

[1] URL: https://math.stackexchange.com/questions/2126259/what-is-the-smallest-example-of-a-connected-regular-graph-which-is-not-vertex-tr.

[2] URL: https://www.maths.gla.ac.uk/~es/srgraphs.php.

[3] L. Babel i dr. "Algebraic Combinatorics in Mathematical Chemistry. Methods and Algorithms. II. Program Implementation of the Weisfeiler-Leman Algorithm". (2010.). URL: https://arxiv.org/abs/1002.1921.

[4] O Bastert. "Stabilization Procedures and Applications". Disertacija. Technische Universit¨ at Munchen, 2000.

[5] V. Krčadinac. *Asocijacijske sheme*.

[6] B. Weisfeiler. *On Construction and Identification of Graphs*. Lecture notes in mathematics. Springer-Verlag, 1976.

[7] B. YU. Weisfeiler i A. A. Leman. "Reduction of a Graph to a Canonical Form and an Algebra Arising during This Reduction". *Nauchno-Technicheskaya Informatsia* (1968.).