arXiv:2601.09506v1 [cs.DM] 14 Jan 2026

关于单纯形游走的数量与图识别的等价规范化

˘Marek Cern´
y
安特卫普大学，安特卫普，比利时
marek.cerny@uantwerp.be

摘要。 当且仅当两个图对于每个图都具有相同数量的同态时，它们才是同构的。因此，通过所有图类上的同态计数，可以在同构意义下识别一个图。将范围限制到特定图类会产生一些自然的同构放宽，并将识别调节到特定的图性质。一个显著的限制是将图类限制为树宽有界的图类，由此得到Weisfeiler–Leman细化（WL）的同构放宽，正如 Dvo˘r´ak [JGT 2010] 所展示的那样。WL 所识别的性质，恰好是能够在带计数量词的一阶逻辑片段中定义的性质，正如 Cai、F¨urer 和 Immerman [Comb. 1992] 所展示的那样。

我们通过单纯形游走的数量刻画了对路径宽度有界图类的限制，并将其形式化为一种细化过程（SW）。SW 所识别的性质，恰好是能够在带计数量词的受限合取一阶逻辑片段中定义的性质；该逻辑由 Montacute 和 Shah [LMCS 2024] 引入。

与 WL 不同，直接计算 SW 通常不是多项式时间可完成的。我们通过用重数自动机表示 SW 来解决这一问题。我们为这些自动机引入对合，从而将规范化简化为标准的前向约简，并省去后向约简。由此得到的规范形式可在时间[1] $O(kn^{3k})$ 内计算，适用于任意具有 n 个顶点的图，以及路径宽度至多为 k 的情形。

关键词： 同态不可区分性· 路径宽度· Weis- feiler–Leman 算法· 可定义规范化· 重数自动机

1 引言

基础研究的社会影响往往是间接的 [38], ，然而图论构成了一个显著的例外。图的许多性质既适用于抽象且定义明确的对象（例如代数或范畴），也适用于具体观测到的对象（例如蛋白质或分子）。一个例子是 Weisfeiler–Leman算法（WL） [42, 41], ，它最近已成为刻画（以及设计）机器学习模型所识别的图性质的默认工具 [43, 33]。

[1] 此 arXiv 版本改进了 LATIN 2026 论文的时间复杂度，原论文来自 $O(kn^{4k})$.

WL的广泛适用性反映了其所处位置的重要性：在过去几十年中，人们揭示了它与各个研究领域之间的联系： k维WL（k-WL）能够识别与带有计数量词 [8] 的一阶逻辑 $(k+1)$变量片段中的所有可定义公式相同的性质，即C^{k+1}所表示的逻辑；也能够识别与树宽至多为 k 的图（图类T_k）上的同态计数相同的性质 [14, 12]。更具体地说，映射到图 G的同态，是从另一个图 F 作为定义域的顶点集到该图顶点集的、保持边关系的映射。事实上，WL会隐式地聚合 G 取自T_k. 的类树图 F 的同态像。最后，Lov´asz [29] 证明，考虑从每个图 F 出发的同态计数，可以确定图 G直到同构。

另一方面，许多由图描述的对象本质上相当线性，具有类路径特征，例如转录核糖核酸序列 [13]后折叠形成的蛋白质。因此，一些基于图中采样游走的学习方法取得了最先进的结果，但这些方法不属于基于 WL 的刻画范围 [27, 39]。与此同时，树状范畴和路径范畴 [2] 能够刻画相当线性的对象。这与一阶逻辑中带计数量词的受限合取 $(k+1)$-变量片段（逻辑 $\mathsf{C}^{k+1}_{\mathsf{R}}$ ）以及通过有界路径宽度图上的同态计数可识别的性质（图类 $\mathcal{P}_{k,1}$） [32]有关。

本文刻画了这些类路径图性质的识别。首先，我们通过考察图 G 上 k 维 WL 的前h 个着色步骤，再确定高阶单纯形游走在图中访问的 h 着色序列的数量，来描述有界路径宽度图类中的同态像（实际上，是更一般的线性图类$\mathcal{P}_{k,h}$）。

定理 1. 对于两个图 G和 H，以下条件等价：

(i) G 和 H 具有相同数量的 h-颜色 k-单纯形游走。*(ii)* G 和 H 在 $P_{k,h}$. 中的图上具有相同的同态计数

上述定理立即导出由受限合取逻辑 $\mathsf{C}^{k+1}_{\mathsf{R}}$ 识别的图性质的刻画，该刻画基于其与$\mathcal{P}_{k,1}$ 的关系，如 Montacute 和 Shah [32, 推论 5.13] 所示。

推论1. 对于两个图 G 和 H，以下条件等价：

(i) G 和 H 具有相同数量的1-颜色 k-单纯形游走。*(ii)* G 和 H 在 $P_{k,1}$ 中的图上具有相同的同态计数。*(iii)* G 和 H 满足逻辑$\mathsf{C}^{k+1}_{\mathsf{R}}$ 中可定义的相同公式。

其次，我们正式定义单纯形游走细化（SW），它类似于 WL。与 WL 不同，WL 为每个顶点元组分配一个关联对象（树状颜色），而 SW 则捕捉与多个颜色单纯形游走的关联。在最坏情况下，这就要求表示指数级数量的对象。我们通过间接表示 SW 来解决这一问题，具体而言，是通过其生成元来表示，并将其表述为重数自动机 （MAs）。

剩下的挑战是比较其最小实现取决于基的选择的 MAs。我们通过为重数

自动机赋予对合 并应用前向约简，消除这种依赖。规范化在实际场景中尤为重要，因为模型会对从数据分布中抽样得到的单个图进行处理。

定理2. 对于 h、$k \geqslant 1$、$n \geqslant 0$，存在一个大小为 $O(kn^{2k})$ 的规范表示 I_{sw}，可在 $O(kn^{3k})$ 时间内计算得到，使得对于任意一个具有 n 个顶点的图 G，$I_{\mathsf{sw}}(G,k,h)$ 识别出的图性质与 $G.$ 中 h 着色的 k 单纯形游走的数量所识别出的图性质完全相同

与之密切相关的是同态不可区分性这一判定问题：两个具有 n 个顶点的图，在$\mathcal{F}$ 上同态不可区分，当且仅当它们在$\mathcal{F}$上的同态计数相同。最近，Seppelt 已证明[37]，当$\mathcal{F}$ $=\mathcal{P}_{k,\ 1}$ 时，存在复杂度为 $\mathrm{O}(k^c n^{7k+7})$ 的多项式时间算法，前提是 $n^{k+1}\log n \geqslant e^{2000}$。我们的定理2通过计算两个图各自的$\mathcal{I}_{\mathsf{sw}}$ 并比较它们是否相等，给出了一个构造性算法。

推论 2。 对于两个在 n 个顶点上的图 G 和 H，其关于 $P_{k,\ 1}$ 的同态不可区分性问题可在 $\mathrm{O}(kn^{3k})$ 时间内判定。

相关工作。 将有限状态自动机视为重数自动机时，其等价性问题及等价性的复杂度最初由 Tzeng [40] 研究。 $\mathbb{Q}$-MA 的最小化复杂度在 [24,23] 中进行了研究，其数值稳定性则在 [25] 中进行了研究。MAs 可识别由有限秩汉克尔矩阵刻画的级数 [15]。当这些矩阵还具有有界范数时， [5] 引入了此类 MAs 的规范形式。其次，我们关于同态计数的结果扩展了 [9] 针对 $k = 1$ 的论证，将着色游走和颜色细化 [4], 与单纯形游走及 WL 算法联系起来。借助 Lov´asz 和 Szegedy [30] 引入的带标记量子图技术，可将同态不可区分性与 WL [14], 量子群 [31, 21],线性方程 [19], 图谱 [34], 或半正定规划 [35] 联系起来。

本文其余部分安排如下。第 3 节 介绍单纯形游走的核心定义。第4 节和第 5 节分别证明我们的主要结果之一，即定理2 和1。在第 4 节中，我们从一般域上对合重数自动机的规范最小实现问题入手，并将所得结果应用于单纯形游走细化的表示。在第 5 节中，我们引入毛毛虫分解，并以此正式定义图类$\mathcal{P}_{k,\ h}$，进而建立这些图类与h-颜色 k-单纯形游走数量之间的联系。命题 的证明推迟至附录。

2 预备知识

对于 t属于 $\mathbb{N}$，令 $[t] \coloneqq \{1, 2, \ldots, n\}.$。对于集合 X，令 $\mathrm{P}(X) \coloneqq \{Y \mid Y \subseteq X\}$。 t-元组 $\boldsymbol{u}$ 属于 X^t，其分量为 $u_i \coloneqq \boldsymbol{u}(i)$，其中 i 属于 $[t]$，且 $X^{\leqslant t} \coloneqq X^0 \cup X^1 \cup \cdots \cup X^t$。下文中，我们将 $\boldsymbol{u}$ 视为映射 $\boldsymbol{u}\colon [k] \to X$，使得 $\boldsymbol{u} = (u_i \mid i \text{ 属于 } [k])$。将 $\boldsymbol{u}$ 的第 p 个元素替换为 x 记作 $\boldsymbol{u}[p \mapsto x]$，删除 $\boldsymbol{u}$ 的第 p 个元素记作 $\boldsymbol{u}[\hat{}p]$，其中 x 属于 X 且 p 属于 $[k].$。最后， $\boldsymbol{u}v$ 表示$(u_1, u_2, \ldots, u_k, v)$ 属于 X^{k+1}，类似地， $v\boldsymbol{u} = (v, u_1, u_2, \ldots, u_k)$ 属于 $X^{k+1}.$

有限无向图 $G=(V,E)$ 是由有限顶点集 $V=V(G)$和对称边关系 $E=E(G)\subseteq V^2$ 构成的一对，我们将其记为 uv 属于 E，其中u,v 属于 V.。图 G 中长度为 t 的游走 是一个由顶点 $\boldsymbol{u}$ 组成的 t-元组，满足u_iu_{i+1} 属于 E，其中 i 属于 $[t-1]$.。路径 是所有顶点互不相同的游走，而闭游走 是满足 $u_1=u_t$. 的游走。对于顶点子集 $S\subseteq V$，我们将其上的诱导子图 记为 $G[S]$，即 $G[S]=(S,E\cap S^2)$.

原子类型与 WL 细化。原子性的概念源自逻辑中的原子公式，参见 [10]。这里，图 G and k 元组 $\boldsymbol{u}$ 在 $V(G)$ 中的原子类型记作 $\mathrm{atp}_k(G,\boldsymbol{u})$，它是定义在 $(G,\boldsymbol{u})$ 与 $(H,\boldsymbol{v})$ 之间的等价类：当且仅当 $u_i=u_j \Leftrightarrow v_i=v_j$ 且 u_iu_j 属于 $E(G) \Leftrightarrow v_iv_j$ 中的 $E(H)$ （对所有 $i,j \in [k]$.）时，$\mathrm{atp}_k(G,\boldsymbol{u}) = = \mathrm{atp}_k(H,\boldsymbol{v})$。

对于图 G 和整数 $k\geqslant 0$， k 维 *Weisfeiler–Leman* 细化（k-*WL*）首先为每个 $h\geqslant 0$ 和 $\boldsymbol{u} \in V(G)^k$ 构造一个着色序列：

$$\chi^{(0)}_{k\text{-wl}} := \mathrm{atp}_k, \quad \chi^{(h+1)}_{k\text{-wl}} := \big(\chi^{(h)}_{k\text{-wl}}, \xi^{(h)}\big), \quad \text{where}$$

$$\xi^{(h)}(G,\boldsymbol{u}) = \Big\{\!\!\Big\{\big(\mathrm{atp}_{k+1}(G,\boldsymbol{u}v), \chi^{(h)}_{k\text{-wl}}(G,\boldsymbol{u}[p\mapsto v]) \mid p\in[k]\big) \,\Big|\, v\in V(G)\Big\}\!\!\Big\}.$$

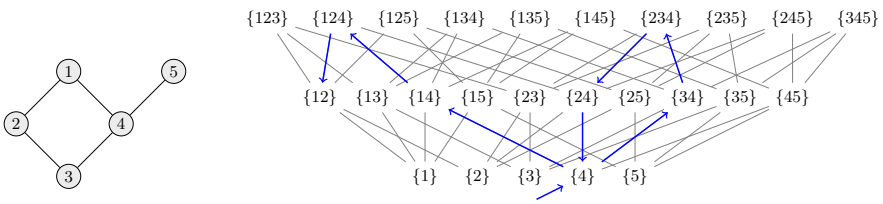
其次， k-WL 定义一列函数 $k\text{-wl}^{(h)}(G) := \big\{\!\!\big\{\chi^{(h)}_{k\text{-wl}}(G,\ \boldsymbol{u}) \mid \boldsymbol{u} \in V(G)^k\big\}\!\!\big\},$，最后， $k\text{-wl}(G) := \{k\text{-wl}^{(h)}(G) \mid h \in \mathbb{N}\}$.

单形与 Hasse图。对于给定的有限顶点集 V，一个（有限）单纯复形是由非空子集组成的族 $K\subseteq\mathcal{P}(V)$，满足 σ in K且非空 $\tau\subseteq\sigma$ 蕴含 τ in K.。 K 中的元素称为单形。单形 σ 的维数为 $\dim\sigma = |\sigma|-1$，若 $\dim\sigma = d.$，则 σ 是一个 d-单形。复形 K的维数记为 $\dim K$，等于其单形维数的上确界。单纯复形 K 的 k-骨架记为 $K(k)$，是 K 中所有满足 $d\leqslant k$.的 d-单形 σ 的集合。

对于给定的定义在集合 K V上的单纯复形，其单形上存在由包含关系给出的继承序 $(K,\ \subseteq)$. 一个*Hasse*图记为$\mathcal{H}(K)$，是一个满足 $V(\mathcal{H}(K)) = K$ 且边按如下方式定义的图 σ: τ属于 $E(\mathcal{H}(K))$ 当且仅当 τ 覆盖 σ 或 σ 覆盖 τ.。由有限单纯复形的定义可知，$\mathcal{H}(K)$ 是一个有限图。参见图 1 (b)。

重数自动机。令 Σ 为一个有限符号集。我们用 $\Sigma^{<\infty}$表示所有有限单词的集合，用 $\Sigma^t\subset\Sigma^{<\infty}$ 表示所有长度为 t. 的单词。空词 记为 ε. 。令 $\mathbb{F}$ 为一个域。一个 $\mathbb{F}$-重数自动机 （$\mathbb{F}$-MA）是一个元组 $\mathcal{A} = (Q,\Sigma,M,\alpha,\eta)$，其中 Q 是一个有限状态集，Σ是一个有限字母表， $M\colon \Sigma\to\mathbb{F}^{Q\times Q}$ 是一个转移矩阵的赋值，而 $\alpha^\top,\eta$ 属于 $\mathbb{F}^Q$，分别是初始向量和终向量。映射 M 唯一地扩展为（幺半群同态），作用于 $\Sigma^{<\infty}$ 中的所有单词 $\boldsymbol{c}=c_1c_2\cdots c_t$，其定义为$M(\boldsymbol{c}) := M(c_1)M(c_2)\cdots M(c_t)$.

系数取自 $\mathbb{F}$ 、定义在 Σ 上的词级数 是形式级数 $\Sigma^{<\infty}\to\mathbb{F}$.。一个 $\mathbb{F}$-MAs $\mathcal{A}$ 识别 由 $\boldsymbol{c}\mapsto\alpha M(\boldsymbol{c})\eta$ 给出的词级数，其中 $\mathbb{F}$ 中的 $\boldsymbol{c}$ 属于 $\Sigma^{<\infty}$，记作 $[\![\mathcal{A}]\!]$. 。如果 $[\![\mathcal{A}_1]\!] = [\![\mathcal{A}_2]\!]$，则两个 $\mathbb{F}$-MAs $\mathcal{A}_1$ 和 $\mathcal{A}_2$ 是等价的，也就是说，它们识别相同的词级数。



(a) 图 G. (b) Hasse图 $\mathcal{H}(K(2))$，其中 $K = \mathcal{P}(V(G) \setminus \emptyset)$。

图1。 图 G. 中的一个 2-单纯复形游走 $\boldsymbol{\sigma}$ （蓝色）

3 单纯形游走

本节介绍单纯形游走，它是图中经典游走的高阶类比。我们还利用它们来定义图分解，详见 第 5 节。

定义 1（单纯形游走）。设 $G = (V、 E)$ 为一个图， $k \geqslant 1$ 为一个整数，并设 $K = P(V)\backslash\{\emptyset\}.$。则， G 中的第 个单纯形游走 t 长度为 t 是图 $H(K(k))$ 中的一条游走 $\boldsymbol{\sigma}$，其长度为 t，且它的第一个单纯形的维数为 0。

由此可知，对于给定的图 G、 G 中长度为 t 的 k-单纯形游走 $\boldsymbol{\sigma}$，以及每个 i，在 $[t-1]$ 个单形中， σ_i 和 σ_{i+1} 不仅在 $\mathrm{H}(\mathrm{P}(V)\backslash\{\emptyset\})$ 中相邻，而且还存在 u，使得 $V(G)$ 中满足 $\sigma_i \sqcup \{u\} = \sigma_{i+1}$ 或 $\sigma_i = \sigma_{i+1} \sqcup \{u\}$。见图 1。在前一种情况下，我们称 u 是边 $\sigma_i\sigma_{i+1}$ 的传入边；后一种情况下则类似地称为传出边。因此，我们将 $\boldsymbol{\sigma}$ 中的每个 d-单形 σ_i 与元组 $[\![\boldsymbol{\sigma}, i]\!]$ 关联起来。该元组属于 $V(G)^{d+1}$，包含 σ_i 中的元素，并按照它们在 $\boldsymbol{\sigma}$ 中作为传入边的顺序排列。见图 2。

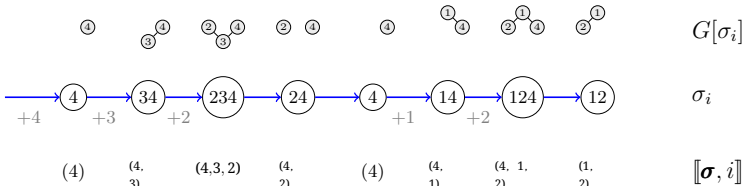


图 2。 单纯形游走 $\boldsymbol{\sigma}$ 属于 G （图 1），其中每个 σ_i 按 $[\![\boldsymbol{\sigma}$排列， $i]\!]$.

定义 2（有色单纯形游走）。 设 $k, h \geqslant 1$，且 $\boldsymbol{\sigma}$ 是图 G 中长度为 t 的 k-单纯形游走，那么 $\boldsymbol{\sigma}$ 的 h-颜色 是单词 $\boldsymbol{c}$，满足 $\boldsymbol{c}(i) = \chi_{k,\ h}(G, [\![\boldsymbol{\sigma}, i]\!])$，对于 i 中的每个 $[t]$，其中 $\chi_{k,\ h}$ 对 $V(G)^{\leqslant k+1}$ 中的每个非空 ℓ-元组 $\boldsymbol{u}$ 均有定义，定义如下：

$$\chi_{k,h}(G, \boldsymbol{u}) := \begin{cases} \chi_{k\text{-wl}}^{(k+h-\ell)}(G, u_1, u_2, \ldots, u_\ell, \ldots, u_\ell) & \text{if } \ell \leqslant k, \\ \mathrm{atp}_{k+1}(G, u_1, u_2, \ldots, u_{k+1}) & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{1}$$

我们称 k-单纯形游走 $\boldsymbol{\sigma}$ 是 $G.$ 中 h-颜色 $\boldsymbol{c}$ 的出现。所谓 h-颜色的 k-单纯形游走的数量，指的是这类出现的数量。

与会对所有顶点的 k-元组进行着色的 k-WL细化相比，我们为所有顶点的 ℓ-元组定义$(k,\ h)$-SW 精化，其中 $\ell \leqslant k+1$.

定义 3（SW 精化）。设 k、$h \geqslant 1$ 和 $G=(V、\ E)$ 为一个图，则 $(k、\ h)$ 单纯形游走细化，简称 $(k、\ h)$-*SW*，首先为 $t \geqslant 0$ 中的每个 ℓ-元组 $\boldsymbol{u}$ 构造如下着色序列

$$\begin{aligned}
\chi^{(0)}_{(k,h)\text{-sw}}(G,\boldsymbol{u}) &:= \{\!\{\chi_{k,h}(G,\boldsymbol{u})\}\!\} \ \textit{if } \ell=1, \ \textit{and } \{\!\{\}\!\} \ \textit{otherwise,}\\
\chi^{(t+1)}_{(k,h)\text{-sw}}(G,\boldsymbol{u}) &:= \xi^{(t)}_{+}(G,\boldsymbol{u}) \uplus \xi^{(t)}_{-}(G,\boldsymbol{u}),
\end{aligned}$$

其中，多重集 $\xi^{(t)}_{+}(G、\ \boldsymbol{u})$ 和 $\xi^{(t)}_{-}(G、\ \boldsymbol{u})$ 定义如下

$$\begin{aligned}
\xi^{(t)}_{+}(G,\boldsymbol{u}) &= \{\!\{\boldsymbol{c}\chi_{k,h}(\boldsymbol{u}) \mid \boldsymbol{c} \in \chi^{(t)}_{(k,h)\text{-sw}}(G,\boldsymbol{u}[\hat{\ell}])\}\!\}\\
&\qquad \textit{if } \ell>1, \ \textit{and } \{\!\{\}\!\} \ \textit{otherwise,}\\
\xi^{(t)}_{-}(G,\boldsymbol{u}) &= \{\!\{\boldsymbol{c}\chi_{k,h}(\boldsymbol{u}) \mid \boldsymbol{c} \in \chi^{(t)}_{(k,h)\text{-sw}}(G,\boldsymbol{v}),\ \boldsymbol{v}[\hat{p}]=\boldsymbol{u},\ p \in [\ell]\}\!\}\\
&\qquad \textit{if } \ell \leqslant k, \ \textit{and } \{\!\{\}\!\} \ \textit{otherwise.}
\end{aligned}$$

其次，$(k、\ h)$-*SW* 在 $V^{\leqslant k}\}\!\}$, 中定义 $(k、\ h)$-$\mathsf{sw}^{(t)}(G) :=$ $\biguplus\{\!\{\chi^{(t)}_{(k,\ h)\text{-sw}}(G、\ \boldsymbol{u}) \mid \boldsymbol{u}$，最后在 $\mathbb{N}\}\!\}$. 中定义 $(k、\ h)$-$\mathsf{sw}(G) := \{\!\{(k、\ h)\text{-}\mathsf{sw}^{(t)}(G) \mid t$

为便于实际应用，正如 第 5 节稍后所阐明的，$(k,\ h)$-SW 精化还会为含有重复顶点的元组赋予颜色。注意，$\chi_{k,\ h}$ 的像中的每种颜色都包含其原子类型，因而记录了所有顶点重复情况。这一观察为以下命题的证明奠定了基础。

命题1. 对于 $k、\ h \geqslant 1$ 和图 G，$(k、\ h)$-$\mathsf{sw}(G)$ 中的重数由 G 中 h着色的 k-单纯形游走的数量决定，反之亦然。

4 等价自动机规范化

本节将使用重数自动机（$\mathbb{F}$-MA）的概念，它可以看作有限自动机的加权扩展。我们定义了 $\mathbb{F}$-MAs的一个子类，对该子类总能找到最小的规范实现。接下来，我们构造能够识别图中所有有色单纯形游走的自动机，最后得到等价的多项式规模典范表示。

定理 2. 对于 $h,\ k \geqslant 1,\ n \geqslant 0$，存在一个规范表示 $\mathcal{I}_{\mathsf{sw}}$，其规模为 $\mathrm{O}(kn^{2k})$，可在 $\mathrm{O}(kn^{3k})$时间内计算得到；对于每个具有 G 个 n顶点的图，$\mathcal{I}_{\mathsf{sw}}(G,\ k,\ h)$ 识别的图性质与以下数量所对应的图性质完全相同：h-着色的 k-单纯形游走在 G.

我们赋予字母表 Σ 额外的对称性。一般来说，像我们这样的元组 $(\Sigma^{<\infty},\ \cdot,\ \varepsilon)$ 在集合 $\Sigma^{<\infty}$ 上构成一个幺半群，当且仅当 $(\cdot)$ 是结合的

算法1： $\mathbb{F}$的前向约简-MA [40, 24]

输入： $\mathcal{A} = (Q,\ \Sigma,\ M,\ \alpha,\ \eta)$

```
S ← ∅                                   // 有限词子集 Σ^{<∞}
F ← []                                  // 𝔽^{Q×∅}中的矩阵
3a q ← [ε]                              // Σ^{<∞}中的词队列
3b q ← [a | a 在 (Σ, ⩽)]                // 替代初始化 of q
4 当 q.为空() 时执行
5     c ← q.弹出()
6     γ ← αM(c)
7     如果 秩([F|γ]) > 秩(F) 则
8         F ← [F|γ]                     // 将 γ 添加为一行
9         S ← S ∪ {c}
10        对 (Σ中的每个 a , ⩽) 执行
11            q.压入(ac)
12 返回 S, F                            // 将矩阵 F 设置为 𝔽^{S×Q}中的 S
```

二元运算，且 ε 是其单位元。对合 是一种一元运算*: $\Sigma^{<\infty} \to \Sigma^{<\infty}$ 满足 $(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{d})^* = \boldsymbol{d}^*\cdot\boldsymbol{c}^*$ 和 $(\boldsymbol{c}^*)^* = \boldsymbol{c}$，对所有 $\boldsymbol{c}$, $\boldsymbol{d}$ 属于 $\Sigma^{<\infty}$.

在同态张量的背景下，Grohe、Rattan 和 Seppelt [19]证明了带对合的幺半群的有限维表示是半单的。在这里，我们不依赖表示论，而是使用赋有对合的重数自动机。全文中，我们采用 $*$记法，用 M*和 $\boldsymbol{v}$* 表示 $\mathbb{F}$ 上的伴随矩阵和向量（即对 $\mathbb{R}$, $\mathbb{Q}$ 进行转置，对 $\mathbb{C}$进行共轭）。

定义 4。重数对合自动机（$\mathbb{F}$-MIA）是满足以下条件的 $\mathbb{F}$-*MA* $A = (Q, \Sigma, M, \alpha, \eta)$:

(I1) 初向量和终向量互为伴随，即 $\alpha^* = \eta$.*(I2)* 字母表 Σ 带有一个对合 *: $\Sigma \to \Sigma$，且对于 Σ 中的每个字母c，都有 $M(c^*) = M(c)^*$.

注意，根据上述定义，对于 $\Sigma^{<\infty}$.中的每个单词 $\boldsymbol{c}$, M 都可扩展为幺半群对合的同态 $\Sigma^{<\infty} \to \mathbb{F}^{Q\times Q}$和 $M(\boldsymbol{c}^*) = M(\boldsymbol{c})^*$

设$\mathcal{A}$ 是 $\mathbb{F}$-MIA，其状态集为 Q ，字母表为 Σ.我们回顾算法1 ，如 [40, 24] 中所述，该算法计算 $\langle \alpha M(\boldsymbol{w}) \mid \boldsymbol{w} \text{ 在 } \Sigma^{<\infty}\rangle$. 中的前向空间的基。由于对合的存在，该空间与 $\langle M(\boldsymbol{w})\eta \mid \boldsymbol{w} \text{ 中 } \Sigma^{<\infty}\rangle$的后向空间 $(M(\boldsymbol{w})\eta)^* = \alpha M(\boldsymbol{w}^*)$.同构。因此，只需进行前向约简，即可得到 $[\![\mathcal{A}]\!]$.<style id="">的最小实现。

算法 1 计算了 F 在 $\mathbb{F}^{S\times Q}$中的基矩阵，其中$S \subseteq \Sigma^{<\infty}$，并且 $|S| \leqslant |Q|$. 注意，第三行有两种选择：行 $3a$对应标准版本，或行 $3b$ （我们的版本）强制要求集合 S 不包含 ε，这一点我们稍后会用到。对于 a 中的每个字母 Σ ，我们有：

$$\widehat{M}(a) = FM(a)F^+, \quad \widehat{\alpha} = \alpha F^+, \quad \widehat{\eta} = F\eta, \tag{2}$$

其中 F^+ 表示右逆 $F^*(FF^*)^{-1}$. 等价地，我们有 $\widehat{M}(a)F = \frown\!\!\!

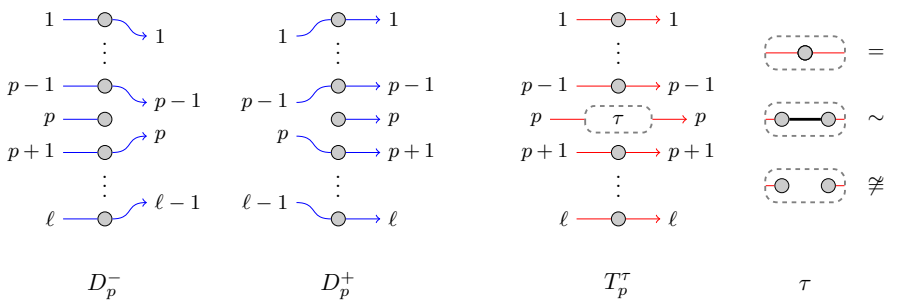


图3. 单纯形游走自动机中不同 ℓ-元组状态之间转移矩阵的示意图。

转移。我们定义用于构造 $\mathbb{Q}$-MIA 的矩阵，另请参见 图 4。首先，出向矩阵 D_p^- 和 入向矩阵 D_p^+ 均属于 $\mathbb{Q}^{Q_k \times Q_k}$，并针对每个 p 属于 $[k]$ 以及所有元组 $\boldsymbol{u}$，$\boldsymbol{v}$ 属于 Q_k 定义如下：

$$D_p^-(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) := \mathbb{1}\{\, \boldsymbol{u}[\hat{p}] = \boldsymbol{v}\,\}, \quad \text{and} \quad D_p^+(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) := \mathbb{1}\{\, \boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}[\hat{p}]\,\}.$$

接下来，对于一个原子类型 τ，我们为每个 $p \in [k]$ 以及所有元组 $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{v} \in Q_k$ 定义 $\mathbb{Q}^{Q_k \times Q_k}$ 上的原子类型矩阵 T_p^τ，其定义如下：

$$T_p^\tau(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) := \mathbb{1}\{\, \mathrm{atp}_2(G, \boldsymbol{u}(p), \boldsymbol{v}(p)) = \tau \text{ and } \boldsymbol{u}[\hat{p}] = \boldsymbol{v}[\hat{p}]\,\}.$$

最后，对于给定的着色 $\chi(G,\ -)\colon V \to C$ 及其颜色 $a \in C$，我们定义颜色划分 矩阵 $P_a \in \mathbb{Q}^{Q_k \times Q_k}$ 如下：

$$P_a(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) := \mathbb{1}\{\, \chi(G,\boldsymbol{u}) = a \text{ and } \boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}\,\}.$$

命题2. </style}对于所有 ∈、原子类型 以及着色中的颜色 、∈，： $V \to C$ 以下性质成立。

(i) 矩阵 P_a 是一个投影，$P_a^2 = P_a$，并且若 $a \neq b$. 则有 $P_a P_b = 0$；***(ii)*** 矩阵 T_p^τ和 P_a 是对称的，且满足 $\left(D_p^+\right)^\top = D_p^-$.

证明。 根据定义。 □

字母表。 字母表 $\Sigma = \Sigma(G,k,h)$ 包含以下形式的符号：(a,s,b)或 (a,τ,p,b)，其中 a,b 是着色 $\chi(G,-)$在 C中的颜色：$V \to C$，且符号 s属于 $\{-,+\}$；或者原子类型 τ属于 $\mathrm{atp}_2(G,-)$中的 Y：$V \to Y$，且索引 p 属于 $[k]$.。对合 $\Sigma \to \Sigma$ 定义如下：

$$(a,s,b)^* = (b,-s,a) \quad \text{and} \quad (a,\tau,p,b)^* = (b,\tau,p,a).$$

对于 Σ中的字母 $(a,s,b),(a,\tau,p,b)$，我们定义以下转移矩阵

$$M((a,s,b)) = \sum_{p\in[k]} P_a D_p^s P_b \quad \text{and} \quad M((a,\tau,p,b)) = P_a T_p^\tau P_b.$$

我们注意到 $M((a,\ s,\ b)^*) = M((a,\ s,\ b))^\top$ 以及 $M((a,\ \tau,\ p,\ b)^*) = M((a,\ \tau,\ p,\ b))^\top$，根据 命题2 的 (ii)。

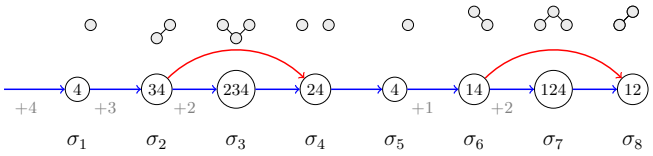


图 4. 在 G 中用不包含三元组的状态集 Q_2 表示的 2-单纯复形游走（蓝色），使用原子类型矩阵（红色）。

定义5（单纯形游走自动机）。设 $k, h \geqslant 1$ 和 $G = (V, E)$ 是一个图，则 单纯形游走自动机 $A(G, k, h)$ 是 $\mathbb{Q}$-*MIA* $(Q_k, \Sigma, M, \mathbf{1}^\top, \mathbf{1})$，其中 Q_k 是状态集，$\Sigma = \Sigma(G, k, h)$ 是字母表，转移矩阵为 $M((a, s, b))$ 和 $M((a, \tau, p, b))$，属于 $\mathbb{Q}^{Q_k \times Q_k}$，其中 $(a, s, b), (a, \tau, p, b)$ 属于 Σ，初始向量和终向量均为 $\mathbb{Q}^{Q_k}$.中的全*1*向量

命题3. 设 k、$h \geqslant 1$ 和 G 为图，则有理级数 $[\![A(G、\ k、\ h)]\!]$ 确定 $(k、\ h)$-sw(G)，反之亦然。

证明（概要）。关键思路是避免显式地将 $(k+1)$-元组用作状态，这会显著增加复杂度。相反，我们使用原子类型矩阵：$(k+1)$-元组仅根据 atp$_{k+1}$着色，而 atp$_k$ 可分解为相邻元组的 atp 和 2 它们不同之处所在顶点的 atp。参见图 4。完整证明见附录 A。

定理5. 设 k，$h \geqslant 1$，并设 G 为图，则存在一种算法 *1* 的实现，用于计算单纯形游走自动机的输出$\mathcal{A}(G,\ k,\ h)$，时间复杂度为$\mathrm{O}(kn^{3k})$.

证明。令 $\Sigma = \Sigma(G、\ k、\ h)$ 和 $n = |V(G)|$. 按照 Tzeng [40] 针对一般$\mathbb{Q}$-MA 的方法，该算法至多扩展矩阵 F（第 8 行）$|Q_k|$次，并将至多 $|Q_k||\Sigma|$ 个元素加入队列（第 11 行）。队列中的每个元素都要进行一次矩阵秩查询（第 8 行），朴素实现的时间复杂度为 O$(|Q_k|^3)$，例如使用高斯消元。Cortes、Mohri 和 Rastogi [11] 通过在整个过程中维护并扩展一份简化行阶梯形的矩阵 F 副本，将查询时间降至 O$(|Q_k|^2)$。因此，时间复杂度为 O$(|\Sigma||Q_k|^4)$，其上界为 O(kn^{5k})，因为$|\Sigma| \leqslant 5kn^{2k}$ 且 $|Q_k| \leqslant n^k$.

对于我们的 SW 自动机，为了得到 $\chi(G、\ -)$：$V \to C$，我们首先运行 h' =min$(k+h$次迭代，$n^k)$ 执行 k-WL 的时间复杂度为 O(kn^{2k+1}). 接下来注意到，根据 命题2 的 (i)，在 $(a、\ldots\ldots、\ b)$、$(c、\ldots\ldots、\ d)$ 中，任何包含两个连续字母 Σ的单词重数均为 0，条件是 $b \neq c$. 为此，若 $\boldsymbol{w} \neq \varepsilon$，我们只需将$5kn^k$ 个元素加入队列（第 11 行），时间复杂度为 O(kn^{4k}).

最后，为了计算 $\gamma = \alpha M(\boldsymbol{w}) = \alpha M(\boldsymbol{w}'(c, \ldots, d)) = \alpha M(\boldsymbol{w}')TP_d$（第 6) 行），我们不仅缓存 $\alpha M(\boldsymbol{w}')$，还缓存 $\alpha M(\boldsymbol{w}')T$.。乘以 P_d 后，会将 d 之外的坐标置零。因此，只需针对 Q_k 上划分中每个由 d 诱导的列子集（大小为 q_d），分别检查 rank $\left(\binom{F}{\gamma}P_d\right)$ >rank (FP_d)。这样，对每个 T（有 $\leqslant 5k$ 种选择），查询次数上界为 $\sum_{d \in C} q_d^2 \leqslant n^{2k}$，字长为 $|\boldsymbol{w}| \leqslant n^k$，从而得到所需的时间复杂度 O$(kn^{3k})$. □

4.2 单纯形游走自动机的不变量

对于图 G，单纯复形游走自动机 $\mathsf{A} = \mathsf{A}(G,k,h)$ 是 $\mathbb{Q}$-MIA，因此根据定理 4，它存在规范形式。更具体地说，我们采用算法1的第 $3b$ 行变体，确保 S 不包含 ε.。事实上，对于 A，我们有依赖关系 $\alpha = \alpha M(\varepsilon) = \sum_a \alpha M((a,=,1,a))$.。因此，前向$\widehat{}$空间仍由矩阵 F 的各行张成，从而得到方程（2）中的 A。

我们使用$\widehat{}$自动机 $\mathcal{A}$定义单纯形游走自动机 $\mathcal{A}$ 的规范不变量 如下

$$\mathcal{I}_{\mathsf{sw}}(G,k,h) = \left(\widehat{\alpha},\, \widehat{\eta},\, \widehat{D}^{+},\, \widehat{D}^{-},\, \widehat{T}_p^{\tau} \,\middle|\, p \in [k],\, \tau \in Y\right), \quad \text{where} \tag{3}$$

$$\widehat{D}^{s} = \sum_{a,b} \widehat{M}((a,s,b)), \quad \text{and} \quad \widehat{T}_p^{\tau} = \sum_{a,b} \widehat{M}((a,\tau,p,b))$$

对于符号 s属于 $\{+,\ -\}$原子类型 τ属于 Y和 a，b遍历 C着色$\chi_{h,\ k}(G,$ $-)$: $V(G) \to C$.最后，我们证明，不变量 公式（3） 提供了所需的表示。

证明 定理2。 对于任意图 G，其具有 n 个顶点，构造其单纯形游走自动机 $\mathcal{A}$。 由于 $\mathcal{A}$ 是一个 $\mathbb{Q}$-MIA，应用 定理 4 可得到最小化自动机 $\widehat{\mathcal{A}}$。 根据(kn^{3k})，其可在时间 O定理5内计算得到，并且 $\mathcal{I}_{\mathsf{sw}}(G,\ k,\ h)$ 的大小为 $O(kn^{2k})$，如定义所述。

$\widehat{}$ $\widehat{}$考虑另一个图 H.根据命题3，$\mathsf{A}(G,k,h) = \mathsf{A}(H,k,h)$当且仅当 G 和 H 在其 h-着色的 k-单纯形游走数量上一致。$\widehat{}$ $\widehat{}$根据 I_{sw}的定义，我们有 $\mathsf{A}(G,$ $k,h) = \mathsf{A}(H,k,h)$ 蕴含 $\mathsf{I}_{\mathsf{sw}}(G,k,h) = \widehat{\mathsf{I}}_{\mathsf{sw}}(H,k,h)$. 反方向只需根据 I_{sw}.重构 A

每个转移矩阵 D $\mathcal{A}$ 都附有一对划分矩阵 P_x和 P_y，对应某些颜色 x，y，即 $D = D_{x,\ y} = P_x D' P_y$属于 $\mathbb{Q}^{Q_k \times Q_k}$.。由此可知，如果 $\chi_{k,\ h}(G,\ \boldsymbol{u}) \neq x$或 $\chi_{k,\ h}(G,\ \boldsymbol{v}) \neq y$.，则矩阵元素 $D(\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})$为零。类似地，我们考虑其在 $\mathbb{Q}^{S \times S}$ 中的最小化版本 $\widehat{D}$ （使得 ε不属于 S），其元素为

$$\widehat{D}(\boldsymbol{c}a,\boldsymbol{d}b) = (FP_x D' P_y F^{+})(\boldsymbol{c}a,\boldsymbol{d}b) = (FP_a P_x D' P_y P_b F^{+})(\boldsymbol{c}a,\boldsymbol{d}b), \tag{4}$$

若满足以下条件则为零： $a \neq x$ 或 $b \neq y$ 根据命题2的 (i)。因此，所需的 $\widehat{}$ $\widehat{}$$D_{x,\ y}$ 由$\sum_{a,\ b} D_{a,\ b}$ 通过选取 S 中以x结尾的单词的所有元素而得到，分别对应 y第一坐标和第二坐标。由于公式 (4)，其余元素均置为零。

5 基于同态计数的图识别

本节将正式定义图类$\mathcal{P}_{k,\ h}$ （定义 7），并展示其与 h-颜色 k-单纯形游走数量之间的以下联系。

定理1。对于两个图 G和 H，以下条件等价：

(i) G 和 H 具有相同数量的 h着色的 k单纯形游走。*(ii)* G 和 H 在 $P_{k,h}$.中的图上具有相同的同态计数

给定两个无向图 $F = (V(F), E(F))$ 和 $G = (V(G), E(G))$，一个顶点映射 $\varphi\colon V(F) \to V(G)$ 若保持边关系，即对于每个 uv in $E(F)$.，都存在 $\varphi(u)\varphi(v)$ in $E(G)$，则称为图同态 $F \to G$。从 F到 G的同态计数记为 $\hom(F,G) = |\{\varphi \mid \varphi\colon F \to G\}|$.

为简化记号，我们给出以下定义，它等价于宽度至多为 k 的路径分解存在，详见附录 B。

定义 6。设 F 是一个图， F 中的 k-单纯形游走为 β 。若 β 是 F 分解的，则称其

(D1) $V(F)$ 中的每个 u 在 β 中恰好传入一次。*(D2)* $E(F)$ 中的每条边 uv 至少包含在一个 β_i 中。

命题 4。一个图存在宽度至多为 k 的路径分解，当且仅当它存在一个分解的 k-单纯形游走。

5.1 标记图与量子图

我们沿用 Lov´asz 和 Szegedy [30]的代数方法。 k-标记图记作 $F^{\boldsymbol{u}}$，它是一个图 F，带有一个指定的 k 元组标记 $\boldsymbol{u}$，取自 $V(F)^k$.。给定两个带标记图 $F^{\boldsymbol{u}}$ 和 $G^{\boldsymbol{v}}$，（标记图）同态 $\varphi\colon F^{\boldsymbol{u}} \to G^{\boldsymbol{v}}$ 是图 $F \to G$ 的同态，且额外满足标记保持不变，即对于每个 i， $\varphi(u_i) = v_i$ $[k]$. 。从 $F^{\boldsymbol{u}}$ 到 $G^{\boldsymbol{v}}$ 的同态计数记作 $\hom(F^{\boldsymbol{u}}, G^{\boldsymbol{v}})$.

一个量子 k-标记图是若干个 k-标记图的有限形式 $\mathbb{R}$-线性组合。对于量子 k-标记图 $F^{\boldsymbol{u}} = \sum_{i=1}^{m} c_i F_i^{\boldsymbol{u}_i}$，每个系数 c_i 都属于 $\mathbb{R}$，而 $F_i^{\boldsymbol{u}_i}$是一个 k-标记图，我们称之为 $F^{\boldsymbol{u}}$. 的组成图。同态计数从组成图线性扩展到 $F^{\boldsymbol{u}}$，如下所示

$$\hom\Big(\sum_{i=1}^{m} c_i F_i^{\boldsymbol{u}_i}, G^{\boldsymbol{v}}\Big) = \sum_{i=1}^{m} c_i \cdot \hom\big(F_i^{\boldsymbol{u}_i}, G^{\boldsymbol{v}}\big).$$

对于（标准） k标记图， $G^{\boldsymbol{u}}$、 $H^{\boldsymbol{v}}$，我们将它们的乘积定义为 $G^{\boldsymbol{u}} \cdot H^{\boldsymbol{v}}$，即它们的不交并 $G \sqcup H$，其中我们还将 u_i 中的顶点与 $V(H)$ 中的顶点 v_i 进行识别，对每个 $[k]$. 中的 i 都如此。请注意，乘积可能会引入自环边和重边。若出现重边，可以移除这种重复，而不改变同态计数。我们有以下恒等式：

$$\hom\big(K^{\boldsymbol{u}} \cdot F^{\boldsymbol{v}}, G^{\boldsymbol{w}}\big) = \hom\big(K^{\boldsymbol{u}}, G^{\boldsymbol{w}}\big) \cdot \hom\big(F^{\boldsymbol{v}}, G^{\boldsymbol{w}}\big),$$

对于任意 k标记图 $K^{\boldsymbol{u}}$ 以及任意 k标记图 $F^{\boldsymbol{v}}$、 $G^{\boldsymbol{w}}$.，恒等式成立。该恒等式也自然推广到量子 k标记图。

关于卵石森林覆盖的定义，参见 [1, 34] 或附录 C。将所有满足以下条件的 ℓ标记图的类记作 $\ell \leqslant k$ 具有一个 k卵石森林覆盖，且深度为 d 的图 $\mathcal{LT}_k^d$. 。接下来我们回顾 $\mathcal{LT}_k^d$. 的一个重要刻画。

定理 7 ([14, 1, 34])。设 $k \geqslant 1$, $d \geqslant 0$ 为整数， $G^{\boldsymbol{u}}$ 和 $H^{\boldsymbol{v}}$ 为两个 k-标记图，则

$$\chi^{(d)}_{k\text{-wl}}(G, \boldsymbol{u}) = \chi^{(d)}_{k\text{-wl}}(H, \boldsymbol{v}) \quad \textit{if and only if} \quad \hom(\mathcal{LT}_k^d, G^{\boldsymbol{u}}) = \hom(\mathcal{LT}_k^d, H^{\boldsymbol{v}}).$$

我们使用一个已知结果，它比定理 7的正向部分更强。

引理 1. 设 $k \geqslant 1$、 $d \geqslant 0$、 $n \geqslant 1$ 为整数，且令 c 为 $\mathrm{Im}(\chi_k^{(d)}\text{-wl})\cdot$ 中的一种颜色。那么存在一个量子 k-标记图 $F^{\boldsymbol{u}}$，其组成图属于 LT_k^d，使得对于每个具有 n 个顶点的 k-标记图 $G^{\boldsymbol{v}}$，都有

$$\hom(F^{\boldsymbol{u}}, G^{\boldsymbol{v}}) \text{ equals } 1 \text{ if } c = \chi_{k\text{-wl}}^{(d)}(G, \boldsymbol{v}), \text{ and } 0 \text{ otherwise.} \tag{5}$$

证明。固定 n，并取 $\chi_k^{(d)}\text{-wl}\cdot$ 的像中的一种颜色 c。根据 [17, 断言 2、定理 5 5.3]（另见 [20, 8]），存在一个公式 $\varphi_c(x_1, \ldots, x_k)$，其中至多有 d 个 C^{k+1} 中的量词，使得对于所有至多有 n 个顶点的图 G

$$c = \chi_{k\text{-wl}}^{(d)}(G, \boldsymbol{v}) \quad \text{if and only if} \quad (G, \boldsymbol{v}) \models \varphi_c(x_1, \ldots, x_k).$$

最后，根据 [14, 引理 6], [34, 引理 A.5],，存在一个量子 k-标记图 $F^{\boldsymbol{u}}$，其组成图属于 $\mathcal{LT}_k^d$，使得对于所有具有 n 个顶点的 k-标记图 $G^{\boldsymbol{v}}$，若 $(G, \boldsymbol{v}) \models \varphi_c(x_1, \ldots, x_k)$，则 $\hom(F^{\boldsymbol{u}}, G^{\boldsymbol{v}}) = 1$ 成立；否则 $\hom(F^{\boldsymbol{u}}, G^{\boldsymbol{v}}) = 0$. □ 成立

5.2 毛毛虫分解与单纯形游走

在最后这一部分，我们将介绍毛毛虫分解，阐明它与已知结果之间的联系，并证明定理 1。

定义 7。 设 F 是一个图。 F 的毛毛虫分解 （*CD*） 是 $[t]$) 中的一个序列 $\boldsymbol{D} = ((\beta_i, L_i) \mid i$，其中 L_i 是 F 的诱导子图，并且对于 $[t]$ 中的每个 i，都有 $\beta_i \subseteq V(L_i)$，满足

(C1) $V(L_i)\backslash\beta_i$ 中的每个顶点 u 都只有 L_i. 中的邻居
(C2) 单纯形游走 $\boldsymbol{\beta}$ 在 $S = F[\beta_1 \cup \beta_2 \cup \cdots \cup \beta_t]$. 中分解
(C3) 对于某个 d_i，每个标记图 $L^{[\![\boldsymbol{\beta}_{\cdot,i}]\!]}$ 都属于 $LT_k^{d_i}$ 或属于 LT_{k+1}^0 和 $d_i = 0$.

我们将诱导子图 S 称为*{style id='2'>*脊柱，将子图 L_i 称为腿。 $\boldsymbol{D}$. *A*宽度是 $\boldsymbol{D}$ 的最小 k，使得 $\boldsymbol{\beta}$ 是一个 k-单纯形游走，而 t 是 $\boldsymbol{D}$的长度。 $\boldsymbol{D}$ 的高度 为最大值$_{i\in[t]}(|\beta_i| + d_i - k)$。

我们将宽度至多为 k 且高度至多为 h的、具有 *CD* 的图类记为 $\boldsymbol{P}_{k,h}$；将具有长度为 $t+1$.的此类 *CD* 的 $\boldsymbol{P}_{k,h}^t \subseteq \boldsymbol{P}_{k,h}$ 记为其子类

命题 5。 对于 $k \geqslant 1$，$\boldsymbol{P}_{k,1}$ 是路径宽度至多为 k的图类；对于 $h \geqslant 1$，图类 $\boldsymbol{P}_{k,h}$ 是 $\boldsymbol{P}_{k+h-1,1}$ 的子类。

由引理 1 可知，从 $\mathcal{LT}_k^d$ 中的任意 k-标记 $L^{\boldsymbol{u}}$ 到 k-标记图 $G^{\boldsymbol{v}}$ 的同态数量，完全由颜色$c = \chi_k^{(d)}\text{-wl}(G, \boldsymbol{v})$. 确定。下面的定义应用了这一事实。

定义 8. 设 F 是一个图， $\boldsymbol{D} = ((\beta_i, L_i) \mid i$ 是其在 $[t])$ 中的毛毛虫分解；设 G 是一个图， $\boldsymbol{c}$ 是一条带颜色的 k- 单纯形游走，使得对于每个 $i \in [t]$，都有 $\boldsymbol{c}(i) \in$ 像$(\chi_{k,h}(G, -))$ 蕴含 $L^{[\![\boldsymbol{\beta}_{\cdot,i}]\!]} \in LT_k^{d_i} \cup LT_{k+1}^0$。于是我们记作 同态$\big((F, \boldsymbol{D}), (G, \boldsymbol{c})\big) \coloneqq \prod_{i=1}^t$同态$\big(L^{[\![\boldsymbol{\beta}_{\cdot,i}]\!]}, \boldsymbol{c}(i)\big)$.

引理 2. 设 $F \in P^t_{k,h}$ 是一个图，其毛毛虫分解 $\boldsymbol{D}$ 的宽度至多为 k，长度至多为 t，并设 G 是任意一个图。那么有

$$\hom(F,G) = \sum_{\boldsymbol{c}} \mu(G,\boldsymbol{c}) \cdot \hom\big((F,\boldsymbol{D}),(G,\boldsymbol{c})\big),$$

其中求和遍历 (k,h)-$\mathsf{sw}^{(t)}(G)$ 的元素，而 $\mu(G,\boldsymbol{c})$ 表示 $\boldsymbol{c}$ 在 (k,h)-$\mathsf{sw}^{(t)}(G)$. 中的重数

证明。设 $\boldsymbol{D} = ((\beta_i, L_i) \mid i$ 是具有脊柱 S 的 $[t])$。考虑 $\psi\colon\ V(S) \to V(G)$，并定义 $\boldsymbol{c}$ 为 $\boldsymbol{c}(i) = \chi_{k,h}(G, \psi(\llbracket \beta, i \rrbracket))$，对 $[t]$. 中的每个 i 都成立。将 ψ 逐元素应用于一个由顶点组成的 ℓ-元组，即 $\psi((u_1,\ldots,u_\ell)) = (\psi(u_1),\ldots,\psi(u_\ell))$.。在图 G 中，重数 $\mu(G,\boldsymbol{c})$ 恰好统计 ψ 在 G. 中的像的数量。由于 CD 的各条腿在脊柱之外互不相交，而脊柱由 ψ 固定，因此，从 F 到 G 且扩展 ψ 的同态数，等于分别从每条腿独立计算的同态计数之积，如定义 8 所述。□

引理 3 ([9, 引理 B.1]). 对于每个整数 $t \geqslant 0$ 以及自然数 D_0、D_1、D_2、……、D_t，都存在整数指数 s_1、s_2 …、s_t，使得 $D_0 \leqslant 2^{s_1}$；并且所有满足 $1 \leqslant d_i < D_i$（其中 i 属于 $[t]$）的 t 元自然数元组 $(d_1$、d_2、……、$d_t)$，都可以用乘积 $p = d_1^{s_1} \cdot d_2^{s_2} \cdot \cdots \cdot d_t^{s_t}$. 单射表示。

引理 4 ([9, 引理 B.2]). 设 $\boldsymbol{x}$ 是 $\mathbb{N}^m_{\geqslant 1}$ 中一个元素互不相同的 m 元组，即当 $i \neq j$ 时 $\boldsymbol{x}_i \neq \boldsymbol{x}_j$；再设 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$ 是 $\mathbb{N}^m$ 中的 m 元组，且满足 $\boldsymbol{a} \neq \boldsymbol{b}$，也就是说，存在 i 属于 $[m]$. 使得 $a_i \neq b_i$。那么存在 k 属于 $\mathbb{N}$，使得

$$\sum_{i=1}^{m} a_i x_i^k \neq \sum_{i=1}^{m} b_i x_i^k. \tag{6}$$

定理 8. 设 k、$h \geqslant 1$、$t \geqslant 0$ 为整数，G 和 H 为图，则 (k,h)-$\mathsf{sw}^{(t)}(G) = (k,h)$-$\mathsf{sw}^{(t)}(H)$ 当且仅当 $\hom(P^t_{k,h}, G) = \hom(P^t_{k,h}, H)$.

证明。假设 (k,h)-$sw^{(t)}(G) = (k,h)$-$sw^{(t)}(H)$.。根据引理 2，对于 $P^t_{k,h}$ 中的每个 F，$hom(F,G)$ 的数量由 (k,h)-$sw^{(t)}(G)$ 中的重数决定。类似地，对于 H，我们得到 $hom(P^t_{k,h}, G) = hom(P^t_{k,h}, H)$.

对于反向方向，我们假设 $(k,\ h)$-$\mathsf{sw}^{(t)}(G) \neq (k,\ h)$-$\mathsf{sw}^{(t)}(H)$，并旨在找到一个图 F，它属于 $\mathcal{P}^t_{k,\ h}$，使得同态计数不同。

根据引理 1，$\mathrm{Im}(\chi_{k,h}(G,-))$ 中每个 h-颜色 e 的 ℓ-元组都由一个量子 ℓ-标记图 $K^{\boldsymbol{u}}_e$ 建模（方程 (5)）。在 $\mathrm{Im}(\chi_{k,h}(G,-)) = \{e_1, e_2, \ldots, e_C\}$ 上固定一个顺序，并令每个 i（属于 $[C]$.）对应 $L^{\boldsymbol{u}}_{e_i} = (i+1) \cdot K^{\boldsymbol{u}}_{e_i}$

对于 $n = |V(G)|$ 以及任意位于 $\boldsymbol{c}$ 中的 $(k,\ h)$-步行$^{(t)}(G)$，将 $\mu(G$ 的 $\boldsymbol{c})$ 重数限定为 $D_0 = n^{kt}$，并令 $D_1 = D_2 = \ldots = D_t = C + 2$. 根据引理 3，存在整数指数 s_1，s_2，……，s_t 使得 $D_0 \leqslant 2^{s_1}$，且对于每个 $d_i < D_i$，存在由 $(\mu(G$ 给出的单射函数，$\boldsymbol{c})$，……，$\boldsymbol{c}(t)) \mapsto$

$$\mu(G,\boldsymbol{c}) \prod_{i=1}^{t} \Big(\hom\big(L^{\llbracket \beta, i \rrbracket}_{\boldsymbol{c}(i)}, \boldsymbol{c}(i)\big)\Big)^{s_i} = \mu(G,\boldsymbol{c}) \prod_{i=1}^{t} \hom\Big(\Big(L^{\llbracket \beta, i \rrbracket}_{\boldsymbol{c}(i)}\Big)^{s_i}, \boldsymbol{c}(i)\Big).$$

最后，通过令引理 4 中的 $\boldsymbol{x}$， $\boldsymbol{a}$， $\boldsymbol{b}$ 在 $[C+2]^t$ 中为

$$\boldsymbol{x}(j) = \prod_{i=1}^{t} \left(\hom\left(L^{[\![\beta, i]\!]}_{\boldsymbol{c}_j(i)}, \boldsymbol{c}_j(i) \right) \right)^{s_i}, \quad \boldsymbol{a}(j) = \mu(G, \boldsymbol{c}_j), \quad \boldsymbol{b}(j) = \mu(H, \boldsymbol{c}_j),$$

其中索引 j 遍历单词 $\boldsymbol{c}_j$ 在 $(k,\ h)$-sw$^{(t)}(G)$. 因此，我们找到了一个足够大的 k F $\boldsymbol{D} = ((\beta_i\ L_i)\,|$，使得从 CD，在 $[t])$ 中得到的量子图，其中 $\bar{L}^{[\![\bar{\beta}}_{i}{}_{i}{}_{i}]\!] = \left(L^{[\![\beta,}{}_{i}{}_{i}]\!]\right)^{k \cdot s_i}$，满足同态$(\bar{F},\ G) \neq$ 同态$(\bar{F},\ H)$. 因此，必然存在一个 F的组成图 F，使得同态$(F,\ G) \neq$ 同态$(F,\ H)$. 根据 $\boldsymbol{D}$的定义，图 F 属于 $\mathcal{P}^t_{k,h}$.

□

定理 定理 *1*的证明。 由定理 8 和 命题1可得。

6 结论

我们将单纯形游走引入为游走的透明高阶类比。这些游走经过着色后，可以刻画由来自诸如 $\mathcal{P}_{k,\ h}$等类的同态计数所识别的图性质。在此基础上，我们开发了 SW 精化和 SW 自动机，从而为基于同态的图性质识别带来了更为通用且渐近更快的算法。对于后续提出的同态不可区分性概念， $h = 1$ 这在渐近意义上优于 [37]。一项关键的技术贡献是使用重数对合自动机，其中前向约简不仅实现了最小化，还消除了对基选择的依赖。此外，我们对 SW 自动机的规范表示在渐近意义上小于重数自动机的规范表示。

我们的主要定理建立了 h着色的k单纯形游走的数量、在$\mathcal{P}_{k,h}$上的同态计数，以及可由受限合取逻辑 C^{k+1} R 定义的公式之间的对应关系。这扩展了经典对应关系，即将 Weisfeiler–Leman 细化、在$\mathcal{T}_k$上的同态以及逻辑 C^{k+1}中的可定义性联系起来。WL 颜色与单纯形游走的结合，体现在毛毛虫分解和 SW 自动机的转移矩阵中，提供了一个颇具前景的框架：它能够用通常比同态张量 [19]更短的序列来刻画类路径结构的同态像。

一个后续的开放问题是， (k, h)-SW 精化在稳定之前所需的步数能否得到比 $O(n^k)$ 更好的上界。 [28, 18] 中的已知结果为这一问题提供了启发，它们给出了 WL 精化步数的上界。解决这一问题将有助于揭示同态计数所依据的限制条件与可能诱导的精化的不动点之间关系的本质。

资助。 本研究得到安特卫普大学（BOF，博士项目 47103）的资助。

致谢。 作者感谢 Peter Zeman 在手稿结构方面给予的指导，并感谢 Floris Geerts 和 Guillermo A. P´erez 就如何构思这项工作所进行的有益讨论。

参考文献

[1] S. Abramsky、A. Dawar 和 P. Wang。《有限模型论中的卵石共单子》。载于：2017年第32届年度 ACM/IEEE 计算机科学逻辑研讨会（LICS）。美国加利福尼亚州洛斯阿拉米托斯：IEEE计算机学会，2017年6月，第1–12页。doi：10.1109/LICS.2017.8005129.[2] Samson Abramsky 和 Luca Reggio。《树状范畴：资源公理化理论》。载于：《计算机科学中的逻辑方法》第19卷、第3期，第14篇（2023年8月）。ISSN：1860-5974。doi：10.46298/lmcs-19(3:14)2023.[3] Samson Abramsky 和 Nihil Shah。《关联结构与能力：计算资源的余单子语义》。载于：《逻辑与计算杂志》31.6（2021年8月），第1390–1428页。ISSN：0955-792X。doi：10.1093/logcom/exab048.[4] L. Babai 和 L. Ku˘cera。《图的规范标记：线性平均时间算法》。载于：计算机科学基础研讨会。1979年，第39–46页。[5] Borja Balle、P. Panangaden 和 Doina Precup。《加权自动机的规范形式及其在近似最小化中的应用》。载于：2015年第30届年度 ACM/IEEE 计算机科学逻辑研讨会（2015），第701–712页。[6] Hans L. Bodlaender。《有界树宽图的部分 k-树丛》。载于：《理论计算机科学》209.1–2（1998年12月），第1–45页。ISSN：0304-3975。doi：10.1016/S0304-3975(97)00228-4.[7] Hans L. Bodlaender、John R. Gilbert、Hj´almt´yr Hafsteinsson 和 Ton Kloks。《树宽、路径宽度、前沿大小和最短消去树的近似》。载于：算法杂志18.2（1995年3月），第238–255页。ISSN：0196-6774。doi：10.1006/jagm.1995.1009.[8] Jin-Yi Cai、Martin F¨urer 和 Neil Immerman。《图识别所需变量数的最优下界》。载于：《组合数学》12.4（1992年），第389–410页。ISSN：1439-6912。doi：10.1007/BF01305232.[9] Marek ˇCern´y。《毛毛虫图神经网络：以高效聚合取代消息传递》。2025年。arXiv：2506.06784 [cs.LG].[10] Chen Chung Chang 和 H Jerome Keisler。《模型论》。第73卷。爱思唯尔，1990年。[11] Corinna Cortes、Mehryar Mohri 和 Ashish Rastogi。《概率自动机的 Lp距离与等价》。载于：《国际计算机科学基础杂志》18（2007年），第761–780页。[12] H. Dell、M. Grohe 和 G. Rattan。《Lov´asz 遇上 Weisfeiler 和 Leman》。载于：自动机、语言与编程国际研讨会。2018年，40:1–40:14。[13] Richard Durbin、Sean R. Eddy、Anders Krogh 和 Graeme Mitchison。《生物序列分析：蛋白质与核酸的概率模型》。剑桥大学出版社，1998年。

[14] Zden˘ek Dvo˘r´ak。《根据同态数量识别图》。载于：《图论杂志》64.4（2010年），第330–342页。doi: 10.1002/jgt.20461.[15] Michel Fliess。《汉克尔矩阵》。载于：《纯粹与应用数学杂志》53（1974年），第197–222页。[16] Eva Fluck、Tim Seppelt 和 Gian Luca Spitzer。《深入与拓宽：有界树深度和树宽图上的计数逻辑与同态不可区分性》。载于：第32届 EACSL 计算机科学逻辑年度会议（CSL 2024）。Aniello Murano 和 Alexandra Silva 编。第288卷。《莱布尼茨国际信息学论文集》（LIPIcs）。德国达格斯图尔：Schloss Dagstuhl – 莱布尼茨信息学中心，2024年，27:1–27:17。ISBN：978-3-95977-310-2。doi:10.4230/LIPIcs.CSL.2024.27.[17] M. Grohe。《描述复杂性、规范化与可定义图结构理论》。剑桥大学出版社，2017年。[18] Martin Grohe、Moritz Lichter 和 Daniel Neuen。《魏斯费勒-莱曼算法的迭代次数》。载于：2023年第三十八届 ACM/IEEE 计算机科学逻辑研讨会（LICS）。2023年，第1–13页。doi: 10.1109/LICS56636.2023.10175741.[19] Martin Grohe、Gaurav Rattan 和 Tim Seppelt。《同态张量与线性方程》。2022年。doi: arXiv:2111.11313v3.[20] N. Immerman 和 E. Lander。《描述图：图规范化的一阶方法》。载于：《复杂性理论回顾：纪念 Juris Hartmanis 六十岁生日（1988年7月5日）》。1990年，第59–81页。[21] Prem Nigam Kar、David E. Roberson、Tim Seppelt 和 Peter Zeman。《量子同构与同态不可区分性的 NPA 层级》。载于：《莱布尼茨国际信息学论文集》334（2025年），105:1–105:19。doi: 10.4230/LIPIcs.ICALP.2025.105。arXiv: 2407.10635 [quant-ph].[22] Stefan Kiefer。《关于重数自动机等价与最小化的札记》。载于：CoRR abs/2009.01217（2020年）。arXiv：2009.01217。[23] Stefan Kiefer、I nes Marusic 和 James Worrell。《重数树自动机的最小化》。载于：《软件科学与计算结构基础》。Andrew Pitts 编。柏林、海德堡：Springer Berlin Heidelberg，2015年，第297–311页。ISBN：978-3-662-46678-0。[24] Stefan Kiefer、Andrzej Murawski、Joel Ouaknine、Bjoern Wachter 和 James Worrell。《关于 Q-重数自动机等价与最小化的复杂度》。载于：《计算机科学中的逻辑方法》第9卷第1期，8（2013年3月）。ISSN：1860-5974。doi: 10.2168/LMCS-9(1:8)2013.[25] Stefan Kiefer 和 Bj¨orn Wachter。《概率自动机最小化的稳定性与复杂度》。载于：《自动机、语言与编程》。Javier Esparza、Pierre Fraigniaud、Thore Husfeldt 和 Elias Koutsoupias 编。柏林、海德堡：Springer Berlin Heidelberg，2014年，第268–279页。ISBN：978-3-662-43951-7。

[26] Ton Kloks。《树宽：计算与近似》。第842卷。《计算机科学讲义》。柏林、海德堡：施普林格，1994年。doi: 10.1007/BFb0045375.[27] Nils M. Kriege。《Weisfeiler 和 Leman 开始游走：重新审视随机游走核》。载于：《神经信息处理系统进展》第35卷。Curran Associates, Inc.，2022年，第20119–20132页。[28] Moritz Lichter、Ilia Ponomarenko 和 Pascal Schweitzer。《游走细化、游走逻辑与魏斯费勒-莱曼算法的迭代次数》。载于：第34届 ACM/IEEE 计算机科学逻辑研讨会论文集。LICS '19。加拿大温哥华：IEEE 出版社。[29] L. Lov´asz。《结构上的运算》。载于：《匈牙利科学院数学学报》18.3（1967年9月），第321–328页。ISSN：1588-2632。doi: 10.1007/BF02280291.[30] L´aszl´o Lov´asz 和 Bal´azs Szegedy。《图代数的收缩器与连接器》。载于：《图论杂志》60.1（2009年），第11–30页。doi: 10.1002/jgt.20343.[31] Laura Man ˇcinska 和 David E. Roberson。《量子同构等价于来自平面图的同态计数相等》。载于：2020年 IEEE 第61届计算机科学基础年度研讨会（FOCS）。2020年，第661–672页。doi: 10.1109/FOCS46700.2020.00067.[32] Yo`av Montacute 和 Nihil Shah。《有限模型论中的卵石关系余单子》。载于：《计算机科学中的逻辑方法》第20卷第2期，9（2024年5月）。ISSN：1860-5974。doi: 10.46298/lmcs-20(2:9)2024.[33] Christopher Morris、Martin Ritzert、Matthias Fey、William L. Hamilton、Jan Eric Lenssen、Gaurav Rattan 和 MartinGrohe。《Weisfeiler 和 Leman 走向神经网络：高阶图神经网络》。载于：AAAI 人工智能会议。2019年，第4602–4609页。[34] Gaurav Rattan 和 Tim Seppelt。《魏斯费勒-莱曼算法与图谱》。载于：2023年 ACM-SIAM 离散算法研讨会论文集（SODA）。工业与应用数学学会，2023年，第2268–2285页。doi: 10.1137/1.9781611977554.ch87.[35] David E. Roberson 和 Tim Seppelt。《图同构与同态不可区分性的 Lasserre 层级》。载于第261卷。《莱布尼茨国际信息学论文集》（LIPIcs）。德国达格斯图尔，2023年，101:1–101:18。ISBN：978-3-95977-278-5。doi: 10.4230/LIPIcs.ICALP.2023.101.[36] M. P. Sch¨utzenberger。《关于一类自动机的定义》。载于：《信息与控制》4（1961年），第245–270页。doi: 10.2307/2271115.[37] Tim Seppelt。《同态不可区分性的算法元定理》。载于：第49届数学基础国际研讨会（MFCS 2024）。第306卷。《莱布尼茨国际信息学论文集》（LIPIcs）。德国达格斯图尔：Schloss Dagstuhl – 莱布尼茨信息学中心，2024年，82:1–82:19。ISBN：978-3-95977-335-5。doi: 10.4230/LIPIcs.MFCS.2024.82。

[38] D.E. Stokes。巴斯德象限：基础科学与技术创新。Rowman & Littlefield Publishers，2011年。 ISBN：9780815719076。[39] Jan T¨onshoff、Martin Ritzert、Hinrikus Wolf 和 Martin Grohe。“走出魏斯费勒-莱曼层级：超越消息传递的图学习”。载于： 机器学习研究汇刊 （2023年）。ISSN：2835-8856。[40] Wen-Guey Tzeng。“非确定性有限自动机的路径等价”。载于：*Inf. Process. Lett.*58.1 （ 1996 年 4 月），第 43–46 页。 ISSN：0020-0190。DOI： 10.1016/0020-0190(96)00039-7。[41] Boris Weisfeiler。图的构造与识别。第558卷。数学讲义。Springer Berlin Heidelberg，1976年。 DOI：10.1007/BFb0089374。[42] Boris Weisfeiler 和 A. A. Lehman。“将图化为规范形式及其约化过程中产生的一种代数”。载于： *Nauchno-Technicheskaya Informatsia* Ser. 2.N9（1968年），第12–16页。[43] Keyulu Xu、Weihua Hu、Jure Leskovec 和 StefanieJegelka。“图神经网络的能力有多强？”载于：国际学习表征会议。2019 年。

命题证明 1 和 3

命题 1。 对于 k， $h \geqslant 1$以及图 G， $(k,\ h)$-单纯形游走(G) 中的重数由 h-着色 k-单纯形游走在 G 中的数量决定，反之亦然。

证明。 固定 $t \geqslant 0$ 并考虑 (k,h)-sw$^{(t)}(G)$. 中的元素 $\boldsymbol{w}$ 。根据定义，着色$\chi_{k,h}$ 总是包含 atp$_\ell$，这表示只要 $\boldsymbol{w}$ 的底层元组包含重复元素，就会出现这种情况。将此条件记为 **(*)**。若 **(*)** 成立，则根据定义， $\xi_{\pm}^{(t)}$ 是 $\boldsymbol{w}$ 中的一个 h-着色 k-单纯形游走，其重数恰好等于它在 G. 中出现的次数。更具体地说， $\xi_{-}^{(t)}$ 收集出向顶点的元组，而 $\xi_{+}^{(t)}$ 收集入向顶点的元组。

反过来，若 **(*)** 不成立，则考虑导致 $\boldsymbol{u}v$ 中发生重复的入顶点 v，以及对应的颜色 $\boldsymbol{w}(i) = \chi_{(k,\ h)}(\boldsymbol{u}v)$ 其中某个$i > 1$ （并且 可能 v 是一个出向顶点，其颜色为 $\boldsymbol{w}(j)$ ，其中某个 $j > i$）。注意，$\boldsymbol{w}(i)$ 由 $\boldsymbol{w}(i-1)$ 决定（并且 $\boldsymbol{w}(j)$ 可能由 $\boldsymbol{w}(j+1)$决定），因此从 $\boldsymbol{w}$ 中删除 $\boldsymbol{w}(i)$ （并且可能删除 $\boldsymbol{w}(j)$），再从 i 到 t （或可能到 $j-1$）的元组中删除顶点 v 后得到的 $\boldsymbol{w}'$ ，由 (k,h)-sw$^{(t-1)}(G)$中的元素 $\boldsymbol{w}''$ 决定（或者可能由 (k,h)-sw$^{(t-2)}(G)$中的元素决定），且重复次数少一次。重复上述步骤，有限次后即可由没有重复的 $\hat{}\boldsymbol{w}$ 决定。 □

命题3。设 k， $h \geqslant 1$ 和 G 为图，则有理级数 $[\![\mathcal{A}(G,\ k,\ h)]\!]$确定 $(k,\ h)$-sw(G) ，反之亦然。

证明。 将 $\mathcal{A}(G、\ k、\ h)$ 的字母表记为 $\Sigma = \Sigma(G、\ k、\ h)$。与 命题1证明中的 **(*)** 类似，只需关注 $\boldsymbol{c}$ 中 $(k、\ h)$-sw$^{(t)}(G)$

其中的颜色不来源于重复顶点的元组。这里，如果某种颜色是 大型的，即它是 $(k+1)$元组的颜色，对应于 $\chi_{(k,\ h)} = \mathrm{atp}_{k+1}$ 中的定义 2所述情形。

对于反向蕴含，考虑单词 $\boldsymbol{c} = c_1 c_2 \dots c_t$ in (k,h)-$\mathrm{sw}^{(t-1)}(G)$。我们将 $\boldsymbol{c}$拆分为不含大颜色的极大部分 $c_i \cdots c_j$。对于这些部分中的每个 $c_i \cdots c_j$，我们使用对应的字母 $\Sigma^{<\infty}$.。由于 $j-i \neq 0$，考虑情形 $j-i=1$，并在 Σ 中使用 $(c_1, =, 1, c_1)$，它们对应于 (c_1). 的重数。否则，若 $j-i>1$，则对于每个 $c_i c_{i+1}$，在 Σ 中使用 (c_i, s, c_{i+1})，使得 s 。在 $\{-$ 中，$+\}$ 取决于 c_{i+1} 是由入顶点还是出顶点得到的（分别为 $\xi_-^{(i+1)}$ 或 $\xi_+^{(i+1)}$），这由原始元组大小确定。对于每个大颜色 $c_j c_{j+1} c_{j+2}$，我们注意到，对于 $c_j c_{j+1}$ 的原始元组，必然会出现入顶点 u；对于 $c_{j+1} c_{j+2}$.，也必然会出现入顶点 v。由于 u 总是作为元组中的最后一个出现，我们取某个对应于 v 结果的 p，并使用字母 (c_j, τ, p, c_{j+2})，其中 $\tau = \mathrm{atp}_2(u,v)$，使得 atp_k 包含于 c_j 中，而 c_{j+2} 与 p 和 τ 一起确定 Im(中的大颜色 atp_{k+1}).

对于正向推论，首先注意到，除了(k,h)-$\mathrm{sw}(G)$ 之外，$[\![\mathrm{A}(G,k,h)]\!]$ 还包含一些不以 1 元组的颜色开头的单词 $\boldsymbol{w}$ 。这并未提供更多信息，因为 $\boldsymbol{w}$ 的重数是所有有色单纯形游走 $c_1 c_2 \dots c_\ell \boldsymbol{w}$. 的重数之和。其次，虽然矩阵$D^-$ 对应于 $\xi_-^{(i+1)}$，矩阵 D^+ 与 D^- 对称，但与 $\xi_+^{(i+1)}$ 不同，它会通过将入顶点 u放在底层 ℓ-元组的所有位置上（而非仅放在最后一个位置），来扩展每个有色游走的出现。给定一个具体的 WL 颜色 $c \in \mathrm{Im}(\chi_{k,h})$，我们注意到，$Q_k$ 上的$\chi_{k,h}(u_1, \dots, u_\ell, v)$ 的计数，以及 $\chi_{k,h}(v, u_1, \dots, u_\ell), \dots, \chi_{k,h}(u_1, \dots, u_{\ell-1}, v, u_\ell)$ 的计数，彼此可以确定。因此，这可能只会使重数发生变化，变化幅度为一个依赖于 c. 的常数因子。(WL) 着色所诱导的 $V(G)^k$ 上的划分具有这一性质，也称为可洗牌的 [18, 观察 3.1]。□

B 图分解与命题 4 的证明

分解。对于给定的图 F，二元组 $(T,\ \beta)$，其中 $T=(V(T),\ E(T))$是一棵树，且 β：$V(T) \to \mathcal{P}(V(T))$ 是一个将顶点映射到袋 的映射；如果满足以下条件，则称其为 G 的树分解：

(T1) $E(F)$ 中的每个 uv 至少属于一个袋，即存在 $V(T)$ 中的 t，使得 $u,\ \beta(t)$. 中的 v (T2) 对于 $V(F)$中的每个 v，$\beta(t)\}]$ 中的诱导子图 $T\,[\{t \mid v$ 是连通且非空的。

树分解的宽度 $(T,\ \beta)$ 定义为最大袋的大小减一，即 $\max_{t \in V(T)} |\beta(t)| - 1$.。图 F的树宽 记为 $\mathrm{tw}(F)$，定义为满足存在一个宽度至多为 k.的 F 的树分解的 $\mathbb{N}$ 中的最小 k

此外，图 F 的路径宽度 记作 $\mathrm{pw}(F)$，是满足以下条件的 $\mathbb{N}$ 中的最小值k：存在一个宽度至多为 k 的树分解 $(P,\ \beta)$，其对应的图为 F

其中 P 是一条路径，也就是说，是一棵最大度数为二的树。在这种情况下，$(P,\ \beta)$是 $F.$ 的路径分解 。将路径宽度至多为 k 的图类记作 $\mathcal{P}_{k,\ 1}$。 如果 $(P,\ \beta)$ 满足以下条件，我们就称其为良好的 路径分解:

（N1）对于每个 st in $E(P)$，都有 $\beta(s) \sqcup \{u\} = \beta(t)$ or $\beta(s) = \beta(t) \sqcup \{u\}$。
（N2）在 $V(P)$ 中存在一个度为一的 s，使得 $|\beta(s)| = 1.$

注意，我们对优美路径分解的定义是优美树分解的一个特殊情形，该定义也用于 [6, 16]。类似于 [26, 引理 13.1。2], 对于优美树分解，每个图 F 都有一个宽度至多为 $\mathsf{pw}(F).$ 的优美路径分解

命题 4。 每个图都有一个宽度至多为 k 的路径分解，当且仅当它具有一个 k-单纯形游走，且该游走是分解的。

证明。 设 $(P,\ \beta)$ 是 F 的一个宽度至多为 k的优美路径分解，假设 $V(P) = [t]$ 和 $E(P) = \{(i,\ i+1) \mid i \in [t-1]\}$ 其中某个 t 属于 $\mathbb{N}.$。取一个单纯复形 $K =$ 的 k-骨架 $K(k)\ \mathcal{P}(V(F))\backslash\{\emptyset\}$，并定义 $\boldsymbol{\sigma} =(\beta(i) \mid i \in [t]).$。根据（N1），由于 $\boldsymbol{\sigma}$ 是哈斯图 $\mathcal{H}(K(k))$ 中的一条游走，它从 $K(k)$ 中的单纯形 $\boldsymbol{\sigma}(1)$开始；根据（N2），.....最后，如果某个顶点传入多于一次或少于一次，则由（T2）与 F 的路径分解定义矛盾。

对于另一个方向，考虑一个长度为 t 、在 $F.$ 中分解的 k-单纯形游走 $\boldsymbol{\sigma}$，。如上所述，取以顶点 $[t]$ 为顶点的路径 P，并为 $[t]$.中的每个 i 定义 $\beta(i) = \boldsymbol{\sigma}(i)$。接下来只需证明，$\beta)$ 是 F 的一个宽度至多为$k.$ 的路径分解。对于$\beta)$，$(P,$ 条件 (T1) 正是 (D2)。条件 (D1) 表明，每个顶点 $u \in V(F)$ 都包含在单个区间 $\{i,\ i+1,\ .....,\ j\} \subseteq [t]$ 对应的袋中，其中 $i \leqslant j$满足某条件；对于路径分解，这等价于 (T2)。此外，注意到 $(P,\ \beta)$ 也是良好的，因为 (N1) 和 (N2) 可由单纯形游走的定义推出。□

C 卵石森林覆盖与命题 5 的证明

树深度。 我们采用以下扩展到空图的定义。设$F = (V,\ E)$ 是一个图，且 $F_1,$ $F_2,\ \ldots F_p$ 是其连通分量，其中p 属于 $\mathbb{N}$；那么，F 的树深度递归定义如下:

$$\mathsf{td}(F) = \begin{cases} 0 & \text{if } p = |V| = 0, \\ 1 + \max_{v \in V}(F[V\backslash\{v\}]) & \text{if } p = 1, \\ \max_{i \in [p]} \mathsf{td}(F_i) & \text{otherwise .} \end{cases}$$

卵石森林覆盖。 我们重述 [3, 34] 中给出的定义。偏序集 $(P, \leqslant)$ 中的链是由两两可比较的元素构成的子集。森林 是一个偏序集$(P, \leqslant)$，其中对每个 x，子集 $P_x = \{y \mid y \leqslant x\}$ 都是一条链。 $P.$ 中森林的深度 是链的最大长度。对于给定的图 F，森林覆盖 是一个森林 $(V(G), \leqslant)$，使得对于每个 $uv \in E(F)$，都有 $u \leqslant v$

或 $v \leqslant u.$。对于这样的图、其森林覆盖以及整数 $k \geqslant 0$， k-卵石函数 是一个映射 p: $V(F) \to [k]$，使得对于每个满足 $u \leqslant v$ 的 $uv \in E(F)$，对于任意满足 $u < w \leqslant v.$ 的 w，都有 $p(u) \neq p(w)$。最后，深度为 d 的k-卵石森林覆盖 是深度为 d 的森林覆盖，连同一个 k-卵石函数。我们用 $\mathcal{T}_k^d.$ 表示具有深度为 d 的 k-卵石森林覆盖的图。

带标签的卵石森林覆盖。给定一个 k-标记图 $F^{\boldsymbol{u}}$ 和整数$\ell \geqslant k$， ℓ-卵石森林覆盖 $F^{\boldsymbol{u}}$ 是一个森林覆盖 $(V(F), \leqslant)$ 以及一个 k-卵石放置函数 p: $V(F) \to [\ell]$，满足以下条件:

(P1) 带标签的顶点集合 $\sigma = \{\boldsymbol{u}(1), \boldsymbol{u}(2), \ldots\ldots, \boldsymbol{u}(k)\}$ 构成一条链；(P2) $V(F)\backslash\sigma$ 中的每个顶点 v 都小于 σ中的所有元素，即 $v \leqslant \min \sigma$；(P3) σ 上的卵石放置函数是单射，即 $p|_\sigma$ 是单射。

将所有满足以下条件的 ℓ-标记图构成的类记为： $\ell \leqslant k$ 具有深度为 d 的k-卵石森林覆盖$\mathcal{LT}_k^d.$

命题 5。对于 $k \geqslant 1$，$\boldsymbol{P}_{k,\ 1}$ 是路径宽度至多为 k的图类；对于 $h \geqslant 1$，图类$\boldsymbol{P}_{k,\ h}$ 是 $\boldsymbol{P}_{k+h-1,\ 1}$的子类。

证明。考虑 F 及其宽度至多为 $[t])$ 、高度至多为 $h.$ 的毛毛虫分解 $\boldsymbol{D} = ((\beta_i, L_i) \mid i$。$L^{\boldsymbol{u}}$ 中的 ℓ-标记图在 $\mathcal{LT}_k^d$中的树深度至多为 $\ell + d$ [34]。由 $\boldsymbol{D}$的高度可知，对于 $L^{[\![\boldsymbol{\beta}_{,i}\ \ i]\!]}$， i 在 $[t].$ 中的树深度为 $\ell + d_i = |\beta_i| + d_i \leqslant k + h$。根据 [7, 引理 11]，（$\mathsf{pw}(F) \leqslant \mathsf{td}(F) - 1$）以及树深度的定义，可得 $\mathsf{pw}(F) \leqslant k + h - 1.$

另一方面，设 F 是一个图，且 (P, β) 是其宽度至多为 k的路径分解。根据 命题 4, (P, β) 可知存在一个 k-单纯形游走$\boldsymbol{\beta}$，其长度为 t'，且在 F中可分解。对每个 i在 $[t']$中，选取 $L_i = F[\boldsymbol{\beta}(i)]$，使条件 (C1) 和 (C3) 自动满足，并选取满足条件 (C2) 的脊柱 $S = F$。我们得到一个宽度至多为 k、高度至多为 $|\boldsymbol{\beta}(i)| + 0 - k \leqslant k + 1 - k \leqslant 1.$ $\square, \boldsymbol{\beta}(i)) \mid i$ 在 $[t'])$中的毛毛虫分解 $\boldsymbol{D} = ((L_i$