arXiv:2611.32595v1 [cs.CC] 24 Nov 2026

带度数界的局部 MPNN 和聚合可满足性是 NEXPTIME-困难

预印本

Marco Sälzer凯撒斯劳滕-兰道大学,
德国凯撒斯劳滕
marco.saelzer@rptu.de

摘要

我们证明，以下问题是**非确定性指数时间**-困难：给定一个带局部求和聚合和 ReLU 激活函数的消息传递神经网络（MPNN） M，以及一个以一元编码的度上界 d，判断是否存在一个带指定节点的图（G, v），其节点标签为有理数、度数至多为 d，且被 M 接受。即使度上界固定为 $d = 3$，该问题仍然是困难的。

1 引言

消息传递神经网络（*MPNN*）是图神经网络中的重要一类，常用于图上的学习任务，例如节点分类。其核心思想很简单：在每一轮（或每一层）中，节点根据自身状态向直接邻居节点或全体节点传递消息。每个节点聚合收到的消息，并将聚合结果与自身状态结合，再通过可学习的前馈神经网络（FNN）获得更新后的状态。

鉴于 MPNN 的重要性，近年来关于 MPNN 推理的研究日益深入，例如验证其行为或刻画其表达能力。在形式化验证中，我们要判断某个 MPNN 是否满足一个精确定义的性质 P，且该性质适用于所有允许的输入图。例如，P 可能要求“如果一个红色节点有超过三个蓝色邻居节点，则它绝不会被接受”，其中接受指的是二元分类。图 1 展示了一个仅采用局部消息传递的 MPNN M 的处理过程，该 MPNN 违反了性质 P。

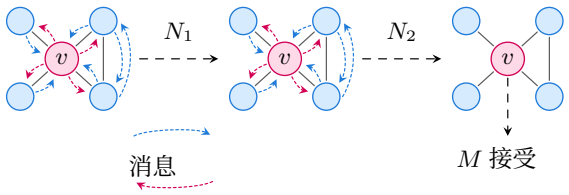


图 1：具有两层（N_1 和 N_2）的 MPNN M 接受了节点 v。因此，M 对于 P而言并不安全。每轮之后，所有节点的状态都会更新（图中未显示）。

此类验证问题会引出涉及MPNN的判定问题——只有始终终止的可靠且完备的验证过程才能决定相应问题。因此，该问题的复杂度限制了此类过程在最坏情况下的效率。一个具有代表性的问题是所谓的 *MPNN* 的可满足性（或非空性）问题。其定义是：给定一个二元分类消息传递神经网络 M，判断 M是否接受图和节点的任意一对（G, v）。其简单形式直接将其与典型的安全性问题联系起来，例如“是否存在任何会被接受的不期望输入？”或者反过来，“我们能否确保不会接受此类输入中的任何一个？”。通常，可满足性的复杂度下界和上界可以沿用到相关问题，或至少为其提供参考。因此，近年来已有大量研究直接研究 MPNN 的可满足性问题 [2–4, 7, 9, 12, 13]，并通过将其表达能力与已有的、复杂度结果已知的形式体系建立联系来开展研究 [1, 5, 6, 8, 10, 11, 14]。

已确立的结果取决于所研究的 MPNN 变体：聚合是局部的、全局的还是兼具二者；采用求和、均值还是最大值进行聚合；以及可学习前馈神经网络部分使用哪些激活函数。在节点标签来自有限集的无向图上，当局部和全局求和聚合可以在同一层中结合时，即使可学习前馈神经网络部分仅使用截断 ReLU 激活函数，采用精确有理数运算的可满足性问题也是不可判定的[3]。在保留其余假设的同时限制为局部聚合，可满足性问题为**PSPACE**-完全 [3, 8]。允许两种聚合形式但将其置于不同层中，仍可保持可判定性，并使用截断 ReLU

激活函数 [2]。相反，量化消息传递神经网络对输入和中间计算均采用有限精度算术，例如定点算术或浮点算术。在有向图上，仅使用局部聚合时，可满足性问题为**PSPACE**-完全 [13]；允许全局读出时，则为**NEXP**-完全 [4]。单调性提供了另一种实现可判定性的途径：在具有布尔节点特征的图上，采用 ReLU 激活函数和阈值分类的单调最大值-求和消息传递神经网络可以转换为带不等式的正 Datalog，从而得到可判定的可满足性问题 [14]。如果不施加单调性限制，即使对于在无向彩色图上采用 ReLU 激活函数的局部求和消息传递神经网络，可满足性问题也是不可判定的 [3]。

限制有效输入图的度数，即考虑度有界可满足性问题（DEGBSAT），是恢复可判定性的另一种方法，即使允许任意有理数节点标签也是如此 [9]。然而，当度上界采用一元编码给出时，已知的**PSPACE**-困难性与**NEXP** 上界之间仍存在差距 [12,定理 6.28 和 6.29]。我们通过证明 DEGBSAT 实际上是**NEXP**-困难的，弥合了这一差距；因此，结合 [12, 定理 6.28] 给出的上界，该问题的复杂度便完全确定为**NEXP**-完全。我们指出，对于固定的度上界 $d = 3$，困难性同样成立。
我们的主要结果通过定理 6.1 在第 6 节中确立，并在下文的推论 6.2 中正式陈述。第 2 节概述了证明，并解释第 3–5 节中构造的有理数编码、多面体条件和神经网络构造如何相互衔接。

人工智能声明

本论文背后的证明思路由 GPT-6 Astra 提出。作者基于这一思路撰写了论文，并在同一模型的进一步协助下检查和完善数学论证、选择合适的相关工作、修改结构和措辞，以及编写用于绘制图形的 TikZ 代码。

2 证明概述

我们证明 DEGBSAT 的 **NEXP**-困难性所采用的方法是标准的：对于每个 $\mathcal{P} \in$ **NEXP**，我们都建立一个从 $\mathcal{P}$ 到 DEGBSAT 的多项式时间（多对一）归约。为便于说明，下面固定这样一个问题 $\mathcal{P}$。
鉴于 $\mathcal{P} \in$ **NEXP**，存在一个非确定性图灵机（NTM）T，它在至多 $2^{p(n)}$ 的时间内判定 $\mathcal{P}$，其中 p 是某个多项式。因此，对于每个 $w \in \mathcal{P}$，T 在 w 上都存在一个长度至多为指数级的接受运行；而当 $w \notin \mathcal{P}$ 时不存在这样的运行。为建立该归约，我们针对每个 w 构造一个局部求和消息传递神经网络 M_w，其构造时间关于 $|w|$ 为多项式时间；当且仅当图-节点对（G，v）的度数至多为三，且该对如图2中（G，v）的示例所示见证了 T 在 w 上的接受运行时，该网络才接受该图-节点对。

图 G 的度数为3，并包含一棵以 v 为根的树 B 作为子图。B 中每个节点的标签除了包含其他辅助信息外，还包含一对配置（c_i，c_j）的有理数编码，表示 T 在 w 上接受运行的一段。根节点 v 包含起始配置和接受终止配置对（c_0，c_8），叶节点包含直接后继配置对（c_i，c_{i+1}），每个内部节点则包含其左子节点的起始配置和右子节点的终止配置。左子节点的终止配置还必须与右子节点的起始配置一致。然而，对于任意输入图，M_w 无法假定这些标签坐标实际编码了配置。因此，在下文中，我们用（$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}$）表示向量对。

关键在于，叶节点、内部节点和根节点的局部条件共同确保所存储的配置对描述了一次接受运行的二叉分解。该分解不必是 G 的树子图：不同分支可能共享节点；将分解展开为树时，我们会把这些节点的各次出现视为不同副本。我们从第3节中确立的非确定性图灵机配置及其对应有理数编码 enc 的标准且性质良好的定义出发，进而得以在第4节中定义向量之间的关系 Δ，并具备以下核心性质：若（$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}$）$\in \Delta$，且 $\boldsymbol{x} =$ enc(c)，即它是配置 c 的有效编码，那么 $\boldsymbol{y} =$ enc(c')，其中 c' 是 c 的有效后继配置；或者 $c' = c$，且 c 接受。后一种情况允许对接受运行进行填充。这一点由引理 4.1 体现。

正确性主要遵循一个归纳不变式，该不变式从叶节点建立到根节点：在每个节点处，只要其子树中的所有检查均成功且 $\boldsymbol{x}$ 编码了一个有效配置，元组 ($\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}$) 就表示一个有效的、可能经过填充的运行片段。在叶节点处，M_w 必须检查 ($\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{y}$) $\in \Delta$，因此基础情形由上文所述的 Δ 性质得出。在内部节点处，局部检查要求两个子节点存储成对的 ($\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{z}$) 和 ($\boldsymbol{z}$，$\boldsymbol{y}$)。从有效编码 $\boldsymbol{x}$ 开始，左子节点的归纳假设给出一个以有效编码 $\boldsymbol{z}$ 结束的有效运行片段。由此，我们可以将归纳假设应用于右子节点，并连接这两个片段，从而在它们的父节点处建立该不变式。在根节点处，第一个端点固定为 enc(c_w)，即 w 上初始配置的有效编码，而

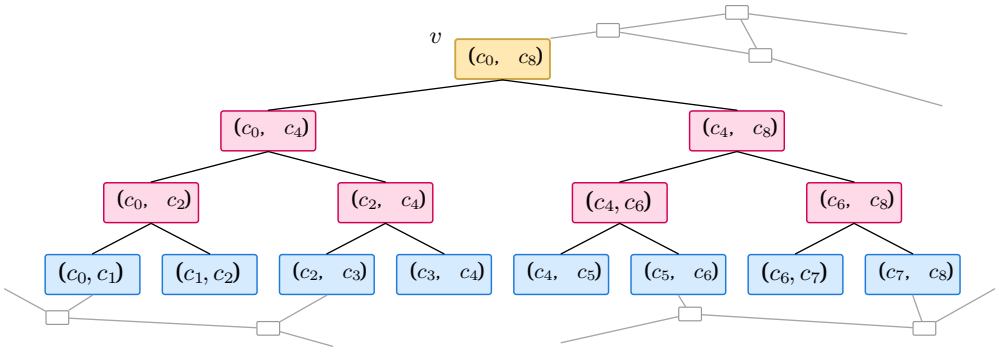


图2：带有一个高亮显示的树子图 B 的图 G，该子图以 v 为根。该树见证了 T 在 w 上的接受运行 $c_0, \ldots, c_8$，其中 $c_0 = c_w$ 和 c_8 接受。每个注释 (c_i, c_j) 表示运行片段端点的有理数编码，并存储在节点的标签中。

最后一个端点必须具有接受状态。因此，在根节点应用该不变式即可表明，该分解见证了 T 在 w 上的一次接受运行。

根据构造， Δ 是有理多面体的有限并（见公式 1），因此可由 ReLU-FNN 识别，正如我们在第5节中所展示的。这意味着可以通过 M_w 的可学习部分检查是否属于 Δ 。对内部节点的检查也可以在单个消息传递轮次中完成。为此，每个节点的标签都指定其在树中的层级，以及它是左子节点还是右子节点。其端点对存储在与该组合相对应的坐标块中，并附带一个设为 1 的标记，而所有其他块都必须为零。这样求和便能将不同层级和子节点位置的贡献分开；对于有效标签，标记会统计每类邻居节点的数量。根节点的层级必须为 0，并且每个内部节点在下一层级必须恰好有一个左子节点和一个右子节点。因此，可以从总和中恢复它们的端点对，并检查端点是否匹配。层级为 $p(|w|)$ 的节点是叶节点。由于 M_w 取决于 w，它可以轻松检查根节点存储的是 $\boldsymbol{x} = \mathrm{enc}(c_w)$。还可以通过检验其最终端点是否属于一个有理多面体的有限并来检查其是否为接受状态，即在第4节中定义的 F。

为汇总局部检查的结果， M_w 在每个节点处存储一个非负误差，当且仅当其局部条件成立时，误差为零。在后续轮次中，每个节点都将其邻居节点的误差加到自身误差上，因此误差不会相互抵消。这里，将运行二叉分解为一棵树至关重要：将接受运行填充至长度 $2^{p(|w|)}$后，递归地将其拆分成两半，可得到一棵高度为 $p(|w|)$ 且度数至多为三的树。因此，尽管运行可能长达指数级， M_w 仍可在 $p(|w|)$ 个消息传递轮次内将误差传播至根节点 v 。当且仅当 v 处累积的误差为零且根条件成立时，它才接受。

由于 T 是固定的， Δ 和 F 具有常数规模的多面体描述。标签块和线性条件的数量均为多项式级别，而且 $\mathrm{enc}(c_w)$ 可在多项式时间内计算，且位长为多项式级别。因此，检查型前馈神经网络可以在多项式时间内构造， M_w中其余多项式数量的层也可以如此构造。

这些要素在定理 6.1 中结合起来，该定理将 M_w 在度数至多为 3 的图上的可满足性与引理 4.1 中的多面体条件联系起来。根据该引理，该条件等价于 T对 w 的接受判定。因此， $w \mapsto (M_w,\ 3)$ 给出了所需的多项式时间归约，从而得到推论 6.2 中的困难性结果。

3 图灵机与配置的有理编码

我们采用非确定性图灵机（NTM）的标准定义：它表示为一个元组 $T = (\Gamma,\ \Sigma,\ Q,\ \delta,\ q_0,\ \square,\ q_F)$，其中 Γ 是有限的工作字母表， $\Sigma \subset \Gamma$ 是输入字母表， Q 是有限的状态集。关系 $\delta \subseteq (Q \times \Gamma) \times (Q \times \Gamma \times \{L, R\})$ 是转移关系， $q_0 \in Q$ 是初始状态， $\square \in \Gamma \setminus \Sigma$ 是空白符号， $q_F \in Q$ 是最终状态。

我们将三元组 $c = (l、(q,\ a)\ r) \in (\Gamma^*) \times (Q \times \Gamma) \times \Gamma^*$ 称为 T的**配置** ，并作如下解释： T处于状态 q，读写头位于符号 a上。词 l 和 r 分别列出读写头左侧和右侧的纸带符号，按距离读写头由近到远排列。因此，如果 $l = a_1 \cdots a_m$，那么纸带的该部分从左到右读作 $a_m \cdots a_1$。我们将 l 和 r 解释为分别表示 $l\square^\omega$ 和 $r\square^\omega$。这一点如图3所示。

令 $aw \in \Gamma^+$ ，并定义 $\mathrm{head}(aw) = a$、$\mathrm{head}(\epsilon) = \square$ 以及 $\mathrm{tail}(aw) = w$、$\mathrm{tail}(\epsilon) = \epsilon$。假设 T 处于配置 $(l,\ (q,\ a)\ r)$ 中，并且存在转移 $((q,\ a),\ (q',\ a',\ L)) \in \delta$，则一个可能的下一配置为

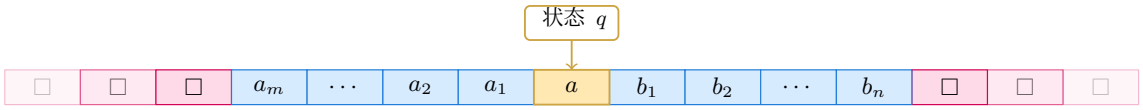


图3: NTM 配置 $c = (l, (q, a)\ r)$ 的可视化，其中包含 $l = a_1 \cdots a_m$ 和 $r = b_1 \cdots b_n$。

(tail(l), (q', head(l)) $a'r$)。类似地，如果存在转移 ((q, a), (q', a', R)) $\in \delta$，则一个可能的下一配置为 ($a'l$, (q', head(r)), tail(r))。如果两个配置 c_i 和 c_j 之间通过转移 t 给出一步，我们记作 $c_i \vdash_t c_j$；如果存在这样一系列的步骤，称为一次运行，我们记作 $c_i \vdash_T^* c_j$。给定一次运行 c_0, ..., c_n，我们称 n 为其长度；如果对于某些 w、$w' \in \Gamma^*$和 $a \in \Gamma$, $c_n = (w, (q_F, a)\ w')$，则称该运行为接受运行。相应地，我们称配置 $c_n = (w, (q_F, a)\ w')$为接受配置。对于满足 $a \in \Sigma$的非空输入 $w = av$，初始配置为 $c_w = (\epsilon, (q_0, a)\ v)$；对于空字 $w = \epsilon$，则为 $c_\epsilon = (\epsilon, (q_0, \square)\ \epsilon)$。

配置的有理数编码

从现在起，不失一般性地假设，T 的工作字母表为 $\Gamma \subset \mathbb{N}$，其符号为 1、.....、$k$。令 $b = k + 2$ 和 $I = [\frac{1}{b-1}, \frac{k}{b-1}]$。对于所有 $a_1 \cdots a_m \in \Gamma^*$，我们定义 $\mathsf{enc}(\overline{a_1 \cdots a_m}) = \sum_{i=1}^{m} a_i b^{-i} + \frac{s}{b-1}()b^m$，其中 s 是表示空白符号的数值[1]。设 $c = (l, (q, a)\ r)$ 为 T 的一个配置。我们将 $\mathsf{enc}(c) \in [0,1]^3$ 表示为三维向量

$$\mathsf{enc}(c) = (\mathsf{enc}(l), \mathsf{enc}(q, a), \mathsf{enc}(r)),$$

其中，$\mathsf{enc}(q, a)$ 是 $[0,1]$ 中所有成对元素 $(q, a) \in Q \times \Gamma$的任意唯一有理数编码。此外，对于所有 $a \in \Gamma$，我们定义 $\mathsf{push}_a, \mathsf{pop}_a$: $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$，其中 $\mathsf{push}_a(x) = \frac{1}{b}(x + a)$，而 $\mathsf{pop}_a(x) = bx - a$。

为了定义第 2 节中已经概述的关系 Δ，我们需要能够保持有效编码的算术带更新。下面的引理为我们提供了这些操作，以及一个用于检验被弹出符号是否正确的方法：从一个有效的带编码开始，push_a 给出扩展后带的编码，而 pop_a 恰好在 I 中，当且仅当a 是距离读写头最近的符号时。这些性质如图4所示。

引理 3.1。令 $w \in \Gamma^*$ 和 $a \in \Gamma$。我们有

(1) $\mathsf{enc}(w) \in I = [\frac{1}{b-1}, \frac{k}{b-1}]$, *(2)* $\mathsf{push}_a(\mathsf{enc}(w)) = \mathsf{enc}(aw)$以及 $\mathsf{pop}_{\mathsf{head}(w)}(\mathsf{enc}(w)) = \mathsf{enc}(\mathsf{tail}(w))$，并且 *(3)* $\mathsf{pop}_a(\mathsf{enc}(w)) \in I$ 当且仅当 $a = \mathsf{head}(w)$。

证明。由于 Γ 的每个符号都介于 1 和 k 之间，因此对于每个 $v \in \Gamma^*$，都有 $\frac{1}{b-1} = \sum_{i=1}^{\infty} b^{-i} \le \mathsf{enc}(v) \le \sum_{i=1}^{\infty} kb^{-i} = \frac{k}{b-1}$。这就证明了 (1)。根据 enc 的定义，我们得到 $\mathsf{enc}(av) = \frac{a}{b} + \frac{\mathsf{enc}(v)}{b}$。对于空词，我们有 $\mathsf{enc}(\epsilon) = \frac{s}{b-1} = \frac{s}{b} + \frac{\mathsf{enc}(\epsilon)}{b}$。令 $h = \mathsf{head}(w)$ 且 $z = \mathsf{enc}(\mathsf{tail}(w))$，因此得到 $\mathsf{enc}(w) = \frac{h}{b} + \frac{z}{b}$，包括 $w = \epsilon$ 的情况。(2) 中的压入恒等式由 $\mathsf{push}_a(\mathsf{enc}(w)) = \frac{a}{b} + \frac{\mathsf{enc}(w)}{b} = \mathsf{enc}(aw)$ 得出。此外，$\mathsf{pop}_a(\mathsf{enc}(w)) = b \cdot \mathsf{enc}(w) - a = h + z - a$。对于 $a = h$，这等于 z，从而证明了 (2) 中的弹出恒等式，并且根据 (1) 属于 I。如果 $a \neq h$，则 $h - a$ 是一个非零整数，因此 $h + z - a \notin I$，因为 $z \in I$ 且 I 的宽度为 $\frac{k-1}{b-1} < 1$。这就证明了 (3)。 □

4 有界非确定性图灵机接受的多面体刻画

多面体 $P \subseteq \mathbb{R}^n$ 定义为 $P = \{\boldsymbol{x} \mid A\boldsymbol{x} \le \boldsymbol{b}\}$，其中 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且 $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$，这意味着它是由线性不等式系统定义的 $\mathbb{R}^n$的子集。如果 A 和 $\boldsymbol{b}$ 可以取有理数项，我们就称 P 有理。同样，我们可以将条件 $A\boldsymbol{x} \le \boldsymbol{b}$视为由 m 个线性不等式构成的合取。从这个角度出发，我们也可以自由地使用线性等式条件来描述多面体。这些等式只需表示为两个线性不等式即可。

我们使用编码 enc 以及操作 push_a、pop_a 来定义关系 Δ。该关系由有理多面体的有限并给出，并具有以下性质：从有效配置编码开始，Δ 描述 T 的一步转移或一个接受配置的重复。随后对其进行迭代复合，即可刻画有界接受。

[1]事实上，$\mathsf{enc}(a_1 \cdots a_m)$ 对无限字 $a_1 \cdots a_m \square^\omega$ 进行编码，这意味着 ϵ 被编码为 $\square^\omega$。

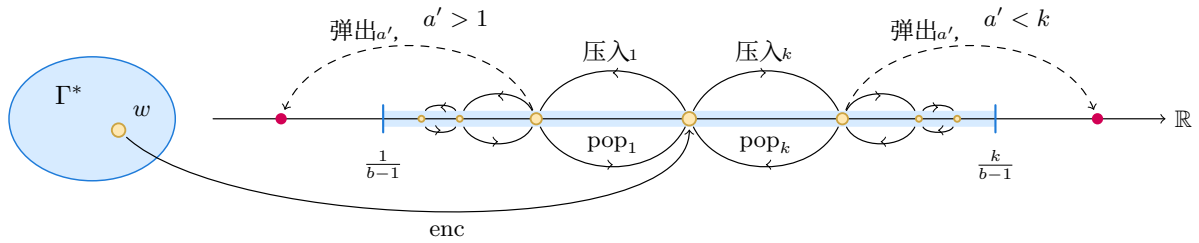


图4：引理 3.1 给出的配置编码的性质 (1)、(2) 和 (3) 的示意图。

对于每个转移 $t = ((q_1, a_1), (q_2, a', d)) \in \delta$ 以及 $a_2 \in \Gamma$，我们为 $d = R$ 定义 R_{t,a_2}，并为 $d = L$ 定义 L_{t,a_2}。为了允许接受配置重复，我们还为每个 $a \in \Gamma$ 定义 P_a：

$$
\begin{aligned}
R_{t,a_2} &= \{((x_1,h_1,y_1),(x_2,h_2,y_2)) \mid x_i, y_i \in I, h_i = \mathrm{enc}(q_i,a_i), x_2 = \mathrm{push}_{a'}(x_1), y_2 = \mathrm{pop}_{a_2}(y_1)\},\\
L_{t,a_2} &= \{((x_1,h_1,y_1),(x_2,h_2,y_2)) \mid x_i, y_i \in I, h_i = \mathrm{enc}(q_i,a_i), y_2 = \mathrm{push}_{a'}(y_1), x_2 = \mathrm{pop}_{a_2}(x_1)\},\\
P_a &= \{((x,h,y),(x,h,y)) \mid x, y \in I, h = \mathrm{enc}(q_F,a)\}.
\end{aligned}
$$

此处，$i \in \{1,2\}$。R_{t,a_2} 和 L_{t,a_2} 中的条件分别描述在右移或左移转移 t 下三元组 $(x_1, h_1, y_1) \in [0,1]^3$ 的更新，并假设此后读写头下的符号为 a_2。注意，这些三元组不一定是 T 的有效编码配置。

每个 R_{t,a_2}、L_{t,a_2} 和 P_a 都是有理多面体：区间 I 具有有理端点，状态-符号对的编码是固定的有理数，而压入和弹出是具有有理系数的仿射映射。共有 $|\delta| \cdot |\Gamma|$ 个转移多面体和 $|\Gamma|$ 个多面体 P_a。我们定义

$$
\Delta = \bigcup_{a \in \Gamma} \Big(P_a \cup \bigcup_{t \in \delta_r} R_{t,a} \cup \bigcup_{t \in \delta_l} L_{t,a}\Big), \tag{1}
$$

其中，δ_r 和 δ_l 表示 δ 的右移和左移转移子集。根据前面的论证，Δ 是有限个 $|\Gamma| \cdot (|\delta| + 1)$ 有理多面体的有限并。

对于 $i \in \mathbb{N}$，我们用 Δ^i 表示 Δ 的 i 次复合，定义为：$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \in \Delta^i$ 当且仅当存在 $\boldsymbol{x}_0, \ldots, \boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^3$，使得 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{y}$ 成立，并且对所有 $1 \le j \le i$ 都有 $(\boldsymbol{x}_{j-1}, \boldsymbol{x}_j) \in \Delta$。特别地，$\Delta^0$ 是恒等关系。我们还定义 $F = \bigcup_{a \in \Gamma} \{(x, \mathrm{enc}(q_F, a)\ y) \mid x, y \in I\}$。

引理 4.1. 设 T 是一个非确定性图灵机，w 是一个输入词，且 $n \in \mathbb{N}$。当且仅当存在某个 $\boldsymbol{x} \in F$，使得 $(\mathrm{enc}(c_w)\ \boldsymbol{x}) \in \Delta^n$ 时，T 在 w 上的接受运行长度不超过 n。

证明。设 c 是从 c_w 出发、长度为 $i \le n$ 的某个接受运行 r 的最终配置。引理 3.1 表明，在 $R_{t,a}$ 和 $L_{t,a}$ 的定义中使用的压入和弹出，刻画了 T 的一步运行语义，而 Δ 的构造进而保证了 r 的每一步都对应于 Δ 中的一对。因此，对其进行 i 次复合可得 $(\mathrm{enc}(c_w), \mathrm{enc}(c)) \in \Delta^i$，其中 $\mathrm{enc}(c) \in F$。若 $i < n$，则集合 $P_a \subseteq \Delta$ 允许我们通过重复 $\mathrm{enc}(c)$ 来填充 r。

对于反方向，设 $\boldsymbol{x} \in F$ 满足 $(\mathrm{enc}(c_w)\ \boldsymbol{x}) \in \Delta^n$。我们首先证明 Δ 保持有效配置编码：若 c 是一个配置，且 $(\mathrm{enc}(c)\ \boldsymbol{z}) \in \Delta$，则或者对于某个 c 的后继配置 c'，有 $\boldsymbol{z} = \mathrm{enc}(c')$；或者 c 是接受配置且 $\boldsymbol{z} = \mathrm{enc}(c)$。为此，写作 $c = (l, (q,a)\ r)$。若 $(\mathrm{enc}(c)\ \boldsymbol{z}) \in R_{t,a_2}$，其中某个 $t \in \delta$ 和 $a_2 \in \Gamma$，则状态-符号对的唯一编码保证 t 适用于 c。此外，根据引理 3.1.3，$\mathrm{pop}_{a_2}(\mathrm{enc}(r)) \in I$ 强制得到 $a_2 = \mathrm{head}(r)$。随后，目标的两个带坐标都具有正确的编码，这由引理 3.1.2 得出。对于 L_{t,a_2} 的论证是对称的，而 P_a 中的一对则只是重复一个接受配置。从有效编码 $\mathrm{enc}(c_w)$ 出发，根据归纳可知，作为见证的链由有效步骤和接受配置的重复组成。因此，其终点 $\boldsymbol{x}$ 是一个有效配置编码，且属于 F 意味着该配置是接受配置。去除填充步骤后，便得到一个长度不超过 n 的接受运行。 □

我们称 T 时间有界于 $f(n)$，对于 $f\colon \mathbb{N} \to \mathbb{N}$，若对所有 $w \in \Sigma^*$，所有以配置 c_w 开始的 T 运行长度均至多为 $f(|w|)$。如果 T 时间有界于 $f(n)$，则由引理 4.1 和 $n = f(|w|)$ 可得

$$
T \text{ 当且仅当 } w \qquad\qquad (\mathrm{enc}(c_w), \boldsymbol{x}) \in \Delta^{f(|w|)} \text{ for some } \boldsymbol{x} \in F.
$$

5 使用 ReLU-FNN 识别有限个多面体的并

具有 ReLU 激活函数的前馈神经网络 N 是由 ReLU 节点构成的 ReLU层的复合。输入维度为 $m \in \mathbb{N}$ 的***ReLU*** 节点 计算函数 $v\colon \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$，其形式为 $v(\boldsymbol{x}) = \max\{0, b + \sum_{i=1}^{m} w_i x_i\}$，其中 $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots\ldots, x_m)$，$w_i \in \mathbb{Q}$ 是输入 i 的权重，$b \in \mathbb{Q}$ 是偏置。***ReLU层*** $\ell\colon \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ 由 n 个这样的节点组成，每个节点接收相同的 m 维输入。具有 k 层的前馈神经网络（*FNN*）定义为 $N = \ell_k \circ \cdots \circ \ell_1\colon \mathbb{R}^{m_1} \to \mathbb{R}^{m_{k+1}}$，其中 $\ell_j\colon \mathbb{R}^{m_j} \to \mathbb{R}^{m_{j+1}}$，适用于 $j = 1, \ldots\ldots, k$。

引理5.1。对于每个有理多面体的有限并 $S \subseteq \mathbb{R}^m$，若 $S = \bigcup_{i=1}^{n} P_i$，则存在一个前馈神经网络 N_S，使得对于所有 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$，都有 $N_S(\boldsymbol{x}) \geq 0$且 $N_S(\boldsymbol{x}) = 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{x} \in S$。

证明。对于空并，取常数网络 $N_S = 1$。否则，令 $P_i = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m \mid A_i\boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{b}_i\}$，其中$A_i \in \mathbb{Q}^{m_i \times m}$ 且 $\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{Q}^{m_i}$ 对 $1 \leq i \leq n$ 成立，并且该不等式按逐分量理解。对于 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$，我们定义

$$\rho_{P_i}(\boldsymbol{x}) = \sum_{j=1}^{m_i} \operatorname{relu}\big((A_i\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}_i)_j\big), \qquad \rho_S(\boldsymbol{x}) = \min_{1 \leq i \leq n} \rho_{P_i}(\boldsymbol{x}),$$

其中 $\operatorname{relu}(y) = \max\{0, y\}$，而 $(\boldsymbol{y})_j$ 表示向量 $\boldsymbol{y}$的第 j 个分量。每个 ρ_{P_i} 均非负，且当且仅当定义 P_i 的所有不等式都成立时等于 0。因此，$\rho_S(\boldsymbol{x}) \geq 0$ 且 $\rho_S(\boldsymbol{x}) = 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{x} \in S$。

每个 ρ_{P_i} 都通过两个 ReLU 层实现：第一层计算各个被加数，第二层计算它们的和。两个非负值的最小值同样可以通过 ReLU 前馈神经网络实现，即 $\min(x, y) = \operatorname{relu}(x - \operatorname{relu}(x - y))$。并行计算所有 ρ_{P_i}，然后依次应用这一构造，即可得到所需的前馈神经网络 $N_S = \rho_S$。 □

此外，引理5.1的证明给出了一个能够识别 S 的前馈神经网络，其大小关于多面体的数量 P_i 以及定义这些多面体的有理参数的总表示大小 A_i，$\boldsymbol{b}_i$呈多项式关系。在本文中及下文中，我们将前馈神经网络的大小定义为其权重和偏置的表示大小之和。

6 局部求和消息传递神经网络上 DEGBSAT 的 NEXP-困难性

局部求和消息传递神经网络（MPNN） M是一个由具有 ReLU 激活函数的前馈神经网络组成的元组 $(N_1, \ldots, N_k)$，其中对于 $i = 1, \ldots, k$，$N_i\colon \mathbb{R}^{2d_{i-1}} \to \mathbb{R}^{d_i}$，并且对于 $d_0, \ldots, d_k \in \mathbb{N}$。给定一个无向图 $G = (V, E, L)$，其节点集为 V、边集为 E，且有理数节点标签为 $L\colon V \to \mathbb{Q}^{d_0}$，$M$ 为每个节点 $v \in V$赋予初始状态 $\boldsymbol{x}_v^{(0)} = L(v)$，并在第 i 层更新其状态，方式如下：

$$\boldsymbol{x}_v^{(i)} = N_i\left(\boldsymbol{x}_v^{(i-1)}, \sum_{\{u,v\} \in E} \boldsymbol{x}_u^{(i-1)}\right).$$

因此，每次更新只使用节点自身的状态以及其邻居节点状态之和。空和表示相应维度的零向量。对于一个带指定节点的图(G, v)，其由图 G 和一个指定节点 $v \in V$组成，我们将 $M(G, v) = \boldsymbol{x}_v^{(k)}$记为 v的最终状态。我们称 M接受(G, v)，当且仅当 $M(G, v)_{d_k} = 1$。

我们将图的度 G 定义为 $\max_{u \in V} |\{w \in V \mid \{u, w\} \in E\}|$。局部求和消息传递神经网络的度有界可满足性问题记为 DEGBSAT，其任务是：给定一个局部求和消息传递神经网络 M 以及一个采用一元编码的度上界 $d \in \mathbb{N}$，判定是否存在一个度至多为 d 的带指定节点的图 (G, v)，使得 M 接受 (G, v)。

我们的目标是证明 DEGBSAT 是**NEXP**-困难的，即每个**NEXP** 中的判定问题都可以在多项式时间内多对一归约到 DEGBSAT。令 $\mathrm{NTIME}(f(n))$ 表示由非确定性图灵机在 $\mathcal{O}(f(n))$ 时间内判定的判定问题类，并令**NEXP** $= \bigcup_{k \geq 1} \mathrm{NTIME}(2^{n^k})$。因此，**NEXP**是可在非确定性指数时间内求解的判定问题类。为建立困难性，固定任意一个问题 $\mathcal{P} \in$ **NEXP** 以及一个在 $2^{p(n)}$ 步内判定$\mathcal{P}$ 的非确定性图灵机 T，其中 p为某个多项式：$\mathbb{N} \to \mathbb{N}$。

定理 6.1. 对于所有 $w \in \Sigma^*$，都存在一个局部求和消息传递神经网络 M_w，使得以下条件等价：

1. 存在一个度数至多为 3 的带指定节点的图（G, v），它被 M_w 接受。
2. 存在 $b \in F$，满足（编码(c_w) b） $\in \Delta^{2^{p(|w|)}}$。

此外，M_w 可以在关于 $|w|$的多项式时间内构造。

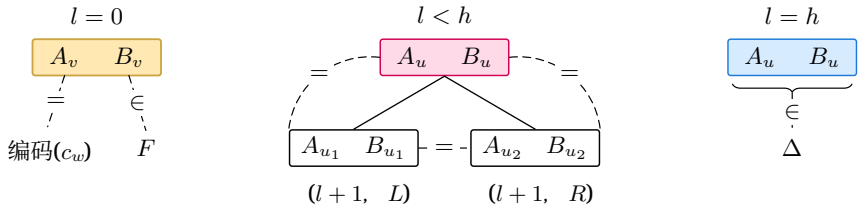


图 5：定理 6.1 证明中有效节点类型所用的端点检查。根节点也满足内部或叶节点检查。

证明。 设定 $h = p(|w|)$，并令 $(G,\ v)$ 为作为 M_w的输入给出的任意度数至多为 3 的带指定节点的图。我们构造 M_w，使其接受 $(G,\ v)$ 当且仅当带指定节点的图 $(G,\ v)$ 为某个 $b \in F$见证 $(\mathsf{enc}(c_w)\ b) \in \Delta^{2^h}$，如图2所示。特别地，$v$的标签包含 $(\mathsf{enc}(c_w)\ b)$ 以及 $b \in F$。其后代节点的标签递归地将每一对拆分为具有匹配端点的两对。经过 h 个层级后，叶节点对必须属于 Δ。在此，我们采用树术语，尽管输入图不一定是树。端点检查如图5所示。

为此，我们构造 M_w，使其在每个节点维护两个非负错误标志。在第一层，$(\boldsymbol{x}_u^{(1)})_1$为 0，当且仅当 u 周围的局部编码条件成立；而 $(\boldsymbol{x}_u^{(1)})_2$ 为 0，当且仅当 u 满足根节点所需的特殊条件。这些标志在每个节点上计算，但在第二标志中，只有位于 v 的标志与接受判定有关。在接下来的 h 层中，每个节点将其邻居节点的第一标志加到自身的第一标志上，并保持第二标志不变。因此，距离 h 以内的所有局部错误都会在第 $h+1$层到达 v。最后一层 N_{h+2} 计算

$$M_w(G, v) = \max\big(0, 1 - (\boldsymbol{x}_v^{(h+1)})_1 - (\boldsymbol{x}_v^{(h+1)})_2\big).$$

因此，M_w 接受 $(G,\ v)$ 当且仅当 v 处的两个标志均为 0。

具体而言，我们按如下方式构造 M_w。我们使用类型 $t = (l,\ x) \in \{0, 1, \ldots, h\} \times \{L, R\}$，其中 l 表示分解中的层级，x 表示左子节点或右子节点。在层级 0，x 的任一取值都允许。有效输入图 $G = (V,\ E,\ L)$ 的初始标记必须具有如下形式 $L\colon\ V \to \mathbb{Q}^d$，其中 $d = 2(h+1) \cdot 7$。只需构造输入维度为 $2d$ 的 N_1，即可强制满足这一条件。我们将每个标签解释为一系列块 $(z_t,\ A_t,\ B_t)$，其中包含 $z_t \in \mathbb{R}$ 和 $A_t,\ B_t \in \mathbb{R}^3$，每种类型 t对应一个。我们要求每个节点 $u \in V$恰好具有一种类型 t，这意味着

$$z_t = 1, A_t, B_t \in [0; 1]^3 \qquad \text{and} \qquad z_r = 0, A_r = B_r = \mathbf{0} \text{ for all } r \neq t.$$

对于类型为 t 的节点 u，我们将其活动标签块记为 $z_u = z_t$、$A_u = A_t$ 和 $B_u = B_t$。我们用撇号表示聚合标签$\sum_{\{u,u'\} \in E} L(u')$ 中对应的块。若所有邻居节点的类型均有效，则 z'_t 统计类型为 t 的邻居节点数量，因为非活动块均为零。若 $z'_t = 1$，则 A'_t 和 B'_t 恰好是该邻居节点所存储的端点。

若节点 u 的类型为 $t = (l,\ x)$，且满足 $l < h$，我们还要求

$$z'_{(l+1,L)} = 1, z'_{(l+1,R)} = 1, \qquad A_u = A'_{(l+1,L)}, B_u = B'_{(l+1,R)}, \qquad \text{and} \qquad B'_{(l+1,L)} = A'_{(l+1,R)}.$$

若 $l = h$，则我们改为要求 $(A_u,\ B_u) \in \Delta$。内部节点 u 的条件会准确识别出一个类型为 $(l+1,\ L)$ 的子节点，以及一个类型为 $(l+1,\ R)$ 的子节点，前提是其邻居节点具有有效类型。L 子节点 u_1 必须从 A_u开始，R子节点 u_2 必须在 B_u结束，且它们的中间端点必须一致，即 $B_{u_1} = A_{u_2}$。因此，若这两个子节点编码了部分运行，它们便会拼接成从 A_u 到 B_u的一次部分运行。

对于每种类型，类型条件与相应的子节点或叶子条件共同定义了 N_1输入空间中的有理多面体有限并。对所有类型取并后，引理5.1使我们能够通过 N_1实现这些检查，使得 $(\boldsymbol{x}_u^{(1)})_1$ 非负，且当且仅当所有局部条件都成立时等于 0。此外，我们使用 N_1 来强制 $(\boldsymbol{x}_u^{(1)})_2$ 非负，且当且仅当对于某个 $x \in \{L, R\}$，u的类型为 $(0,\ x)$、$\mathsf{enc}(c_w)$ 和 $B_u \in F$时等于 0。这些根条件同样定义了有理多面体的有限并，因此可以再次应用引理 5.1。通过 N_1即可并行实现这两项检查。

假设 M_w 接受 $(G,\ v)$。则所有局部条件在距 v 不超过 h 的范围内成立，根条件在 v 处成立。从 v 开始，我们沿着局部条件所规定的子节点前进。在层级 $l < h$ 到达的节点与 v 的距离至多为 l，因此其所有邻居节点都位于距离 h 以内，并且具有有效类型。于是，聚合坐标恰好确定了每种所需类型的一个子节点。以下归纳不要求沿不同分支到达的节点彼此不同。通过从层级 h 向上进行归纳，每个在层级 l 到达的节点 u 都满足 $(A_u,\ B_u) \in \Delta^{2^{h-l}}$：

在叶节点处这显然成立；而在内部节点处，两个子节点对之所以能够组合，是因为它们的中间端点一致。因此，在根节点处，我们得到（enc(c_w) B_v） $\in \Delta^{2^h}$，其中有 $B_v \in F$。

反过来，假设对于某个 $b \in F$，(enc(c_w) b) $\in \Delta^{2^h}$。根据定义，从 enc(c_w) 到 b 在 Δ 中存在一条包含 2^h 步的链，且所有条目都在 $[0,1]^3$ 中。我们构造一棵高度为 h 的完全二叉树，其根节点存储这条链的端点。递归地，两个子节点分别存储该链的前半段和后半段的端点。我们根据层级和子节点位置分配类型，为根节点选择 $(0, L)$，并将所有非活动块设为零。于是，叶节点在 Δ 中存储成对元素。所有局部条件均成立，并且根条件在 v 处成立。由于 enc(c_w) 是有理数，且 Δ 中的每一步都使用有理仿射更新，因此所有标签都是有理数。该树的度数至多为 3，且 M_w 接受这个带指定节点的图。

最后，构造 M_w 所需的时间关于 $|w|$为多项式时间。由于 T 是固定的， Δ 和 F 各由常数个有理多面体组成。共有 $2(h+1)$ 种类型，每种类型对应常数个多面体，其中第一标记包含 $\mathcal{O}(h+1)$个线性条件。根条件也对应常数个多面体。除 enc(c_w) 的各项外，它们的所有系数都是固定的；enc(c_w) 的各项可在多项式时间内计算，且其关于$|w|$的位长为多项式。因此，根据引理5.1的构造，可得到一个规模为多项式的前馈神经网络 N_1。剩余的 $h+1$ 层规模为常数，并且 $h = p(|w|)$关于 $|w|$为多项式。 □

根据引理 4.1，定理 6.1 可针对每个 $w \in \Sigma^*$ 在多项式时间内构造一个局部求和消息传递神经网络 M_w；该网络接受某个度数至多为 3 的带指定节点的图，当且仅当 $w \in \mathcal{P}$成立。现在，将 w 映射到（M_w，3），此映射可在关于 $|w|$的多项式时间内完成，由此得到从 $\mathcal{P} \in$ **NEXP** 到 DEGBSAT 的所需归约。

推论 6.2. DEGBSAT 是 ***NEXP***-难的，即使度上界固定为 3。

7 结论

我们证明，对于在具有有理数节点标签的图上、带有 ReLU 激活函数的局部求和消息传递神经网络，DEGBSAT 是**NEXP**-难的，即使度上界固定为 3。结合已知上界 [12, 定理 6.28], ，这确立了度上界以一元编码给出时的 **NEXP**-完全性。

对于标签取自 $\{0,1\}^m$ 的有色图，或固定的有限有理数标签集，同一度有界问题属于**PSPACE**。可以即时猜测并检验见证树，仅保留一条多项式长度的分支，以及相关节点状态和部分邻居和。这些值具有多项式位长，因此该过程使用非确定性多项式空间，而这等于**PSPACE**。

对于不受限有理数标签，该论证对见证标签的位长缺少多项式上界。我们的构造利用这一自由度来编码具有任意长磁带内容的配置。MPNN 在局部检验这些编码之间的转移，并通过求和聚合将结果组合起来，以验证一条长度至多为指数的接受运行。这一组合得到 **NEXP**-难性。

致谢

感谢 Martin Lange 在我们于 [9] 首次遇到这个问题时与我进行讨论。

参考文献

[1] Pablo Barceló、Egor V. Kostylev、Mikaël Monet、Jorge Pérez、Juan L. Reutter 和 Juan Pablo Silva。《图神经网络的逻辑表达能力》。载于第八届学习表征国际会议，*ICLR 2020*，埃塞俄比亚亚的斯亚贝巴，*2020*年*4*月*26*日至*30*日。OpenReview.net，2020年。URL https://openreview.net/ forum?id=r1lZ7AEKvB。[2] Michael Benedikt、Chia-Hsuan Lu、Alex Perry 和 Tony Tan。《使用全局与局部Presburger量词化判定二变量逻辑》，2026年。URL https://arxiv.org/abs/2610.39108。[3] Michael Benedikt、Chia-Hsuan Lu 和 Tony Tan。《通过逻辑刻画判定图神经网络》。*ACM*计算逻辑汇刊，27(2):13:1–13:65，2026年。doi: 10.1145/3800944。[4] Artem Chernobrovkin、Marco Sälzer、François Schwarzentruber 和 Nicolas Troquard。《带读出的量化图神经网络验证是可判定的，但极难处理》。载于 Renata Wassermann、Marie-Laure Mugnier 和 Franz Baader 编，第*23*届知识表示与推理原理国际会议论文集，*KR 2026*，葡萄牙里斯本，*2026*年*7*月*20*日至*23*日，2026年。doi: 10.24963/KR.2026/83。

[5] Bernardo Cuenca Grau、Eva Feng 和 Przemyslaw Andrzej Walega。《有界图神经网络与一阶逻辑片段之间的对应关系》。载于 Sven Koenig、Chad Jenkins 和 Matthew E. Taylor 编，第四十届人工智能 *AAAI* 会议、第三十八届人工智能创新应用会议、第十六届人工智能教育进展研讨会，*AAAI 2026*，新加坡，*2026*年*1*月*20*日至*27*日，第19135–19142页。AAAI Press，2026年。doi: 10.1609/AAAI.V40I23.38987。[6] Martin Grohe。《图神经网络的描述复杂性》。*TheoretiCS*，3:25，2024年。doi: 10.46298/ THEORETICS.24.25。[7] Chia-Hsuan Lu、Tony Tan 和 Michael Benedikt。《通过轻量级可满足性测试进行图神经网络鲁棒性验证》。载于系统构造与分析的工具和算法——第*32*届国际会议，*TACAS 2026*，作为软件理论与实践国际联合会议 *ETAPS 2026* 的一部分举行，意大利都灵，*2026*年*4*月*11*日至*16*日，论文集，第一部分，计算机科学讲义第16505卷，第3–22页。Springer，2026年。doi: 10.1007/978-3-032-22752-2_1。[8] Pierre Nunn、Marco Sälzer、François Schwarzentruber 和 Nicolas Troquard。《一种用于聚合-组合图神经网络推理的逻辑》。载于第三十三届人工智能国际联合会议论文集，*IJCAI 2024*，韩国济州，*2024*年*8*月*3*日至*9*日，第3532–3540页。ijcai.org，2024年。URL https://www.ijcai.org/proceedings/2024/391。[9] Marco Sälzer 和 Martin Lange。《消息传递神经网络形式化验证的基本极限》。载于第十一届学习表征国际会议，*ICLR 2023*，卢旺达基加利，*2023*年*5*月*1*日至*5*日。OpenReview.net，2023年。URL https://openreview.net/forum?id=WlbG820mRH-。[10] Moritz Schönherr 和 Carsten Lutz。《具有均值聚合的图神经网络的逻辑刻画》。载于 Sven Koenig、Chad Jenkins 和 Matthew E. Taylor 编，第四十届人工智能 *AAAI* 会议、第三十八届人工智能创新应用会议、第十六届人工智能教育进展研讨会，*AAAI 2026*，新加坡，*2026*年*1*月*20*日至*27*日，第25218–25225页。AAAI Press，2026年。doi: 10.1609/AAAI.V40I30.39713。[11] Arie Soeteman、Michael Benedikt、Martin Grohe 和 Balder ten Cate。《存在节点标识符时，图神经网络的表达能力如何？》*CoRR*，abs/2601.21882，2026年。doi: 10.48550/ARXIV.2601.21882。URL https://doi.org/10.48550/arXiv.2601.21882。[12] Marco Sälzer。《神经网络模型形式化验证的复杂性》。博士学位论文，德国，卡塞尔大学，电气工程与计算机科学系，2025年。URL https://kobra.uni-kassel.de/items/378d2c97-5d29-48ef-9087-1f2c59eacd59。[13] Marco Sälzer、François Schwarzentruber 和 Nicolas Troquard。《验证量化图神经网络是PSPACE-完全的》。载于 James Kwok 编，第三十四届人工智能国际联合会议论文集，*IJCAI-25*，第4660–4668页。人工智能国际联合会议组织，2025年8月。doi: 10.24963/ijcai.2025/519。主会论文。[14] David Tena Cucala、Bernardo Cuenca Grau、Boris Motik 和 Egor V. Kostylev。《关于单调最大和图神经网络与Datalog之间的对应关系》。载于第*20*届知识表示与推理原理国际会议论文集，*KR 2023*，第658–667页。IJCAI组织，2023年。doi: 10.24963/kr.2023/64。