第2章:消息传递范式

(English Version)

消息传递是实现GNN的一种通用框架和编程范式。它从聚合与更新的角度归纳总结了多种 GNN模型的实现。

消息传递范式

假设节点 v 上的的特征为 $x_v \in \mathbb{R}^{d_1}$,边 (u,v) 上的特征为 $w_e \in \mathbb{R}^{d_2}$ 。 消息传递范式 定义 了以下逐节点和边上的计算:

边上计算:
$$m_e^{(t+1)} = \phi\left(x_v^{(t)}, x_u^{(t)}, w_e^{(t)}\right), (u, v, e) \in \mathcal{E}.$$

点上计算: $x_v^{(t+1)} = \psi\left(x_v^{(t)}, \rho\left(\left\{m_e^{(t+1)}: (u, v, e) \in \mathcal{E}\right\}\right)\right).$

在上面的等式中, ϕ 是定义在每条边上的消息函数,它通过将边上特征与其两端节点的特征相结合来生成消息。 **聚合函数** ρ 会聚合节点接受到的消息。 **更新函数** ψ 会结合聚合后的消息和节点本身的特征来更新节点的特征。

本章路线图

本章首先介绍了DGL的消息传递API。然后讲解了如何高效地在点和边上使用这些API。本章的最后一节解释了如何在异构图上实现消息传递。

- 2.1 内置函数和消息传递API
- 2.2 编写高效的消息传递代码
- 2.3 在图的一部分上进行消息传递
- 2.5 在异构图上讲行消息传递