



Title: Path2Vec: Representation Learning for Node Sequences Based on Contrastive Learning
(Path2Vec: 対照学習に基づくノードシーケンスの表現学習)

Authors: Takayasu Fushimi and Yuki Kawasaki
(伏見 卓恭(東京工科大学・CS 学部・講師, 川崎優輝 (研究室の学生))

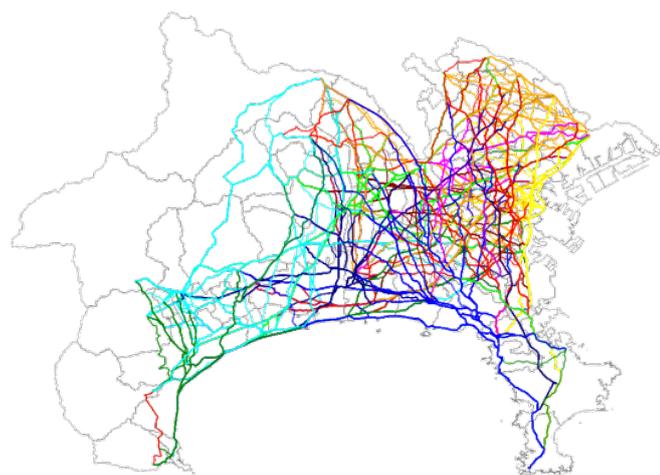
Journal: 16th International Conference on Social Networks Analysis and Mining, ASONAM 2024

掲載年月: 2025 年 3 月

研究概要: 本研究では、グラフ上のノード列 (パス) を効果的に埋め込む手法「Path2Vec」を提案する。既存のグラフ埋め込み技術は主にノードやエッジの特徴を学習することに重点を置いているが、本研究ではノードの出現順序と特性を考慮し、ノード列全体を埋め込むことを目的とする。提案手法では、出発点・中間点・終点を固定し、ランダムウォークによるデータ拡張を行い、ノード列の埋め込みを学習する。特に、自己教師あり学習の一種である **Contrastive Learning** を利用し、類似するノード列の埋め込みが近くなるように学習を行う。評価実験では、実際の道路ネットワークデータを用いて手法の有効性を検証し、提案手法がノード列の特徴を適切に捉えられることを示した。

研究背景: 近年、機械学習技術を用いたグラフ解析が進展し、ノードやエッジの埋め込みに関する研究が数多く行われている。一方で、ノード列 (パス) に着目した埋め込み手法はほとんど研究されていない。しかし、SNS 上の情報拡散経路や道路ネットワーク上の経路推薦など、多くの実世界の問題ではノード列の類似性を適切に捉えることが求められる。例えば、同じ都市を通る経路が景観の類似性を持つ場合や、SNS での情報拡散経路が特定の属性のユーザ間で類似する場合など、ノードの特性とその出現順序を考慮した埋め込みが必要である。これらの課題に対処するために、本研究ではノード列を一つのユニットとして埋め込み、類似するノード列が近く配置されるようにする手法を開発した。

研究成果: 提案手法 Path2Vec では、GraRep を用いたノード埋め込みに加え、ランダムウォークによるデータ拡張と Contrastive Learning を組み合わせることで、ノード列の埋め込みを学習する。特に、NTXent (Normalized Temperature-Scaled Cross-Entropy) ロスの改良版を導入し、ノード列の類似度に応じた埋め込みベクトルの配置を最適化した。実験では、道路ネットワーク (図参照) を対象に提案手法を評価し、従来手法 (SimCLR や単純なノード埋め込みの平均) と比較して、Path2Vec がより適切な埋め込みを生成できることを示した。具体的には、ノード列の平均最小マッチング距離 (MMD) と埋め込みベクトルの類似度 (SIM) の相関が高いことが確認され (表参照)、提案手法の有効性が実証された。



Methods	pos	sim	neg	opp
Path2Vec \mathbf{z}	0.917	>0.382	>0.000	>-0.921
SimCLR \mathbf{z}'	0.967	>0.001	=0.001	= 0.000
Encoder \mathbf{y}	0.839	>0.355	>0.000	>-0.831
Baseline \mathbf{g}	0.784	>0.670	>0.434	<0.822

表：学習結果のベクトル間の類似度

図：神奈川県道路網 (ネットワーク) におけるパス群

社会的・学術的なポイント：Path2Vec は、SNS の情報拡散分析、交通ネットワークの経路推薦、Web ページ間のリンク構造解析など、多様な応用分野に貢献できる。特に、ノード列の類似性を適切に計算することで、より精度の高いルート推薦や情報拡散パターンの解析が可能になる。また、本研究は Contrastive Learning をノード列の埋め込みに応用した点で学術的にも新規性があり、グラフ機械学習の分野に新たな視点を提供する。さらに、教師なし学習の枠組みを採用しているため、ラベルのないデータでも適用可能であり、実世界の様々なデータに対して有用であることが期待される。

用語解説：

グラフ埋め込み：グラフのノードやエッジを、機械学習モデルが扱いやすい数値ベクトル（埋め込みベクトル）に変換する手法のこと。例えば、Node2Vec や DeepWalk などの手法がある。本研究では、ノード単体ではなくノード列全体の埋め込みを行う点が特徴的である。

ノード列（パス）：グラフ上で特定の順序でノードが並んだ列（経路）のこと。多くのグラフ解析では個々のノードの埋め込みを学習するが、実世界ではノードの順序や経路が重要になることが多い（例：道路ネットワーク、情報伝播経路）。Path2Vec は、こうしたノード列の類似性を適切に学習する。

Contrastive Learning（対照学習）：教師なし学習の一種で、「類似するデータは近く、異なるデータは遠く」に埋め込むよう学習する手法。本研究では、類似するノード列同士が近いベクトルになるように埋め込みを学習する。SimCLR などの画像処理分野で用いられる手法をグラフ埋め込みに応用。