

## 柳澤 溪甫

東京工業大学 情報理工学院 助教  
博士（工学）



生年月日 1991 年 5 月 13 日生まれ（33 歳）

### 学歴・職歴

2010 年 4 月	東京工業大学 工学部 情報工学科 入学
2014 年 3 月	東京工業大学 工学部 情報工学科 卒業（首席卒業）
2014 年 4 月	東京工業大学 大学院情報理工学研究科 計算工学専攻 修士課程 入学
2016 年 3 月	東京工業大学 大学院情報理工学研究科 計算工学専攻 修士課程 修了
2016 年 4 月	東京工業大学 情報理工学院 情報工学系 博士後期課程 進学
2017 年 4 月	日本学術振興会 特別研究員 (DC2)（～2019 年 3 月）
2019 年 3 月	東京工業大学 情報理工学院 情報工学系 博士後期課程 修了
2019 年 4 月	日本学術振興会 特別研究員 (PD)（～2020 年 3 月）
2019 年 4 月	東京大学 特別研究員（～2020 年 3 月）
2019 年 11 月	東京工業大学 非常勤講師（～2020 年 3 月）
2020 年 4 月	東京工業大学 助教（～2024 年 9 月）
2020 年 9 月	株式会社 Tokyo Tech Innovation 非常勤講師（～現在）
2024 年 10 月	東京科学大学 助教（～現在）

## 外部・競争的資金等の獲得状況

2017 年 4 月～2019 年 3 月

科学研究費助成事業 特別研究員奨励費 (DC2) 「数億化合物の部分構造の重複を利用した分割統治型ドッキング手法の開発」総額 2,100 千円 (17J06897、代表)

2019 年 4 月～2020 年 3 月

科学研究費助成事業 特別研究員奨励費 (PD) 「標的結合部位の網羅的探索と結合化合物の選別を可能にする共溶媒計算手法の開発」総額 1,820 千円 (19J00878、代表)

2020 年 4 月～2023 年 3 月

科学研究費助成事業 若手研究 「マルチタスク深層学習によるタンパク質の隠された薬剤結合部位の網羅的予測」総額 4,290 千円 (20K19917、代表)

2020 年 10 月～2021 年 3 月

東京工業大学 情報理工学院 若手研究プロジェクト支援「共溶媒分子動力学シミュレーションによる薬剤候補構造最適化支援」総額 496 千円 (代表)

2022 年 4 月～2025 年 3 月

科学研究費助成事業 基盤研究 (B) 「部分構造の重複を利用した大規模化合物データベース向けバーチャルスクリーニング手法」総額 17,030 千円 (22H03684/23K24939、分担、代表者：秋山 泰)

2022 年 6 月～2023 年 3 月

東京工業大学 情報理工学院 若手研究プロジェクト支援「インバース共溶媒分子動力学法による薬剤部分構造が好むタンパク質表面の同定」総額 500 千円 (代表)

2023 年 4 月～2027 年 3 月

科学研究費助成事業 基盤研究 (B) 「共溶媒分子動力学計算を用いた薬剤標的タンパク質の選抜と環状ペプチド設計の同時実行」総額 18,590 千円 (23H03495/23K28185、代表)

2023 年 8 月～2026 年 3 月

新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) 量子・AI ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業 量子・AI アプリケーション開発・実証「量子・AI ハイブリッドによる創薬向け大規模 Virtual Screening 法の開発」分担額 47,190 千円 (総額 224,587 千円、分担、代表者：岩崎 元一)

2024 年 10 月～2026 年 9 月

公益財団法人 栢森情報科学振興財団 2024 年度研究助成金「共溶媒分子動力学法によるタンパク質化合物ドッキング計算のスコア関数の改善」総額 1,000 千円 (代表)

2025 年 4 月～2030 年 3 月

科学研究費助成事業 基盤研究 (B) 「代表フラグメントに基づく縮約化合物ライブラリを用いたバーチャルスクリーニング手法」総額 18,850 千円 (25K03215、分担、代表者：秋山 泰)

## 受賞 (8 件)

- 2009 年 9 月 全国高校化学グランプリ 2009 銅賞 受賞
- 2014 年 3 月 東京工業大学 情報工学科 優秀学生賞 受賞
- 2014 年 7 月 IPAB コンテスト 審査員特別賞 学生奨励賞 受賞  
「拘束付き Docking による化合物探索」
- 2015 年 6 月 情報処理学会 2014 年度 SIGBIO 学生奨励賞 受賞  
「Drug clearance pathway prediction based on semi-supervised learning」
- 2015 年 7 月 第 2 回 IPAB コンテスト 学生奨励賞 受賞  
「深層学習を用いたヒト c-Yes キナーゼ阻害化合物の予測 DEDENNE: Druggability Estimator by Deep Neural Network」
- 2017 年 12 月 第 4 回 IT 創薬コンテスト グランプリ (Schrödinger K.K.賞) 受賞  
「ストラクチャーベース手法とリガンドベース手法の融合による化合物ヴァーチャルスクリーニング」
- 2020 年 2 月 令和元年度手島精一記念研究賞 博士論文賞 受賞  
「Fast structure-based virtual screening with commonality of compound substructure」
- 2021 年 3 月 令和元年度東工大教育賞 優秀賞 受賞  
「大学院を対象とするデータサイエンス・AI 全学教育プログラム」  
(代表者：三宅 美博)

## 論文・発表等

**h-index = 12** (2025 年 4 月 1 日時点、Google Scholar から取得)

### 査読付論文 19 報 (うち 筆頭著者論文 または 共同筆頭著者論文 9 報)

1. Jianan Li, **Keisuke Yanagisawa**, Yutaka Akiyama. “CycPeptMP: enhancing membrane permeability prediction of cyclic peptides with multi-level molecular features and data augmentation”, *Briefings in Bioinformatics*, 25: bbae417, 2024/8. (ダブルカラム 12 ページ、被引用数 8)
2. **Keisuke Yanagisawa**<sup>†</sup>, Takuya Fujie, Kazuki Takabatake, Yutaka Akiyama<sup>†</sup>. “QUBO Problem Formulation of Fragment-Based Protein-Ligand Flexible Docking”, *Entropy*, 26: 397, 2024/4.  
(<sup>†</sup> 共同責任著者、シングルカラム 15 ページ、被引用数 2)
3. Genki Kudo<sup>†</sup>, **Keisuke Yanagisawa**<sup>†</sup>, Ryunosuke Yoshino, Takatsugu Hirokawa. “AAp-MSMD: Amino Acid Preference Mapping on Protein-Protein Interaction Surfaces Using Mixed-Solvent Molecular Dynamics”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63: 7768-7777, 2023/12.  
(<sup>†</sup> 共同筆頭著者、被引用数 4)
4. Jianan Li, **Keisuke Yanagisawa**, Masatake Sugita, Takuya Fujie, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “CycPeptMPDB: A Comprehensive Database of Membrane Permeability of Cyclic Peptides”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63: 2240-2250, 2023/3.  
(被引用数 37)
5. Masatake Sugita, Takuya Fujie, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Lipid composition is critical for accurate membrane permeability prediction of cyclic peptides by molecular dynamics simulations”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62: 4549-4560, 2022/9. (被引用数 18)
6. **Keisuke Yanagisawa**, Rikuto Kubota, Yasushi Yoshikawa, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Effective protein-ligand docking strategy via fragment reuse and a proof-of-concept implementation”, *ACS Omega*, 7: 30265-30274, 2022/8. (被引用数 5)
7. **Keisuke Yanagisawa**, Ryunosuke Yoshino, Genki Kudo, Takatsugu Hirokawa. “Inverse Mixed-Solvent Molecular Dynamics for Visualization of the Residue Interaction Profile of Molecular Probes”, *International Journal of Molecular Sciences*, 23: 4749, 2022/4.  
(シングルカラム 14 ページ、被引用数 0)
8. Kazuki Takabatake, **Keisuke Yanagisawa**, Yutaka Akiyama. “Solving Generalized Polyomino Puzzles Using the Ising Model”, *Entropy*, 24: 354, 2022/2.  
(シングルカラム 21 ページ、被引用数 14)
9. Jianan Li, **Keisuke Yanagisawa**, Yasushi Yoshikawa, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Plasma protein binding prediction focusing on residue-level features and circularity of cyclic peptides by deep learning”, *Bioinformatics*, 38: 1110-1117, 2022/2. (被引用数 14)

10. **Keisuke Yanagisawa**. “Virtual Screening Methods with a Protein Tertiary Structure for Drug Discovery”, *JSBi Bioinformatics Review*, 2: 76-86, 2021/10. (被引用数 1)
11. Kazuki Takabatake, Kazuki Izawa, Motohiro Akikawa, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Improved Large-Scale Homology Search by Two-step Seed Search Using Multiple Reduced Amino Acid Alphabets”, *Genes*, 12, 1455, 2021/9.  
(シングルカラム 12 ページ、被引用数 1)
12. Masatake Sugita, Satoshi Sugiyama, Takuya Fujie, Yasushi Yoshikawa, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Large-Scale Membrane Permeability Prediction of Cyclic Peptides Crossing a Lipid Bilayer Based on Enhanced Sampling Molecular Dynamics Simulations”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61, 3681–3695, 2021/7.  
(被引用数 76)
13. **Keisuke Yanagisawa**, Yoshitaka Moriwaki, Tohru Terada, Kentaro Shimizu. “EXPRORER: Rational cosolvent set construction method for cosolvent molecular dynamics using large-scale computation”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61, 2744–2753, 2021/6.  
(被引用数 15)
14. Masahiro Mochizuki, Shogo D. Suzuki, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “QEX: Target-specific druglikeness filter enhances ligand-based virtual screening”, *Molecular Diversity*, 23, 11–18, 2019/2. (被引用数 17)
15. Takashi Tajimi, Naoki Wakui, **Keisuke Yanagisawa**, Yasushi Yoshikawa, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Computational prediction of plasma protein binding of cyclic peptides from small molecule experimental data using sparse modeling techniques”, *BMC Bioinformatics*, 19, 527, 2018/12. (ダブルカラム 14 ページ、被引用数 13)
16. **Keisuke Yanagisawa**, Shunta Komine, Rikuto Kubota, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Optimization of memory use of fragment extension-based protein-ligand docking with an original fast minimum cost flow algorithm”, *Computational Biology and Chemistry*, 74, 399–406, 06/2018. (被引用数 4)
17. Takanori Hayashi, Yuri Matsuzaki, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “MEGADOCK-Web: an integrated database of high-throughput structure-based protein-protein interaction predictions”, *BMC Bioinformatics*, 19, 62, 05/2018.  
(ダブルカラム 12 ページ、被引用数 31)
18. **Keisuke Yanagisawa**, Shunta Komine, Shogo D. Suzuki, Masahito Ohue, Takashi Ishida, Yutaka Akiyama. “Spresso: An ultrafast compound pre-screening method based on compound decomposition”, *Bioinformatics*, 33, 3836–3843, 03/2017. (被引用数 15)
19. Shuntaro Chiba, Takashi Ishida, Kazuyoshi Ikeda, Masahiro Mochizuki, Reiji Teramoto, Y-h. Taguchi, Mitsuo Iwadata, Hideaki Umeyama, Chandrasekaran Ramakrishnan, A. Mary Thangakani, D. Velmurugan, M. Michael Gromiha, Tatsuya Okuno, Koya Kato, Shintaro Minami,

- George Chikenji, Shogo D. Suzuki, **Keisuke Yanagisawa**, Woong-Hee Shin, Daisuke Kihara, Kazuki Z. Yamamoto, Yoshitaka Moriwaki, Nobuaki Yasuo, Ryunosuke Yoshino, Sergey Zozulya, Petro Borysko, Roman Stavniichuk, Teruki Honma, Takatsugu Hirokawa, Yutaka Akiyama, Masakazu Sekijima, “An iterative compound screening contest method for identifying target protein inhibitors using the tyrosine-protein kinase Yes”, *Scientific Reports*, 7, 12038, 09/2017.  
(シングルコラム 13 ページ、被引用数 34)
20. Shuntaro Chiba, Kazuyoshi Ikeda, Takashi Ishida, M. Michael Gromiha, Y-h. Taguchi, Mitsuo Iwadata, Hideaki Umeyama, Kun-Yi Hsin, Hiroaki Kitano, Kazuki Yamamoto, Nobuyoshi Sugaya, Koya Kato, Tatsuya Okuno, George Chikenji, Masahiro Mochizuki, Nobuaki Yasuo, Ryunosuke Yoshino, **Keisuke Yanagisawa**, Tomohiro Ban, Reiji Teramoto, Chandrasekaran Ramakrishnan, A. Mary Thangakani, D. Velmurugan, Philip Prathipati, Junichi Ito, Yuko Tsuchiya, Kenji Mizuguchi, Teruki Honma, Takatsugu Hirokawa, Yutaka Akiyama, Masakazu Sekijima. “Identification of potential inhibitors based on compound proposal contest: Tyrosine-protein kinase Yes as a target”, *Scientific Reports*, 5, 17209, 12/2015.  
(シングルコラム 13 ページ、被引用数 47)
21. **Keisuke Yanagisawa**, Takashi Ishida, Yutaka Akiyama. “Drug Clearance Pathway Prediction Based on Semi-supervised Learning”, *IPSJ Transactions on Bioinformatics*, 8, 21–27, 08/2015.  
(被引用数 0)

査読付き国際会議論文 7 報 (うち 筆頭著者論文 2 報)

22. Kazuki Takabatake, Kazuki Izawa, Motohiro Akikawa, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Improved Homology Search for Metagenomic Analysis by Two-Step Seed Search with Reduced Amino Acid Alphabets”, *The 10th International Conference on Bioinformatics and Biomedical Science (ICBBS2021)*, 2021/10.
23. Kazuya Isawa, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Antisense oligonucleotide activity analysis based on opening and binding energies to targets”, In *Proceedings of the 27th International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA'21)*, 2021/7.
24. Masahito Ohue, Ryota Ii, **Keisuke Yanagisawa**, Yutaka Akiyama. “Molecular activity prediction using graph convolutional deep neural network considering distance on a molecular graph”, In *Proceedings of the 25th International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA'19)*, 2019/7.
25. Takashi Tajimi, Naoki Wakui, **Keisuke Yanagisawa**, Yasushi Yoshikawa, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Computational prediction of plasma protein binding of cyclic peptides from small molecule experimental data using sparse modeling techniques”, *The 29th International Conference on Genome Informatics (GIW 2018)*, 2018/12.

26. **Keisuke Yanagisawa**, Shunta Komine, Rikuto Kubota, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “Optimization of memory use of fragment extension-based protein-ligand docking with an original fast minimum cost flow algorithm”, *The 16th Asia Pacific Bioinformatics Conference (APBC2018)*, 2018/1.
27. Takanori Hayashi, Yuri Matsuzaki, **Keisuke Yanagisawa**, Masahito Ohue, Yutaka Akiyama. “MEGADOCK-Web: an integrated database of high-throughput structure-based protein-protein interaction predictions”, *The 16th Asia Pacific Bioinformatics Conference (APBC2018)*, 2018/1.
28. **Keisuke Yanagisawa**, Shunta Komine, Shogo D. Suzuki, Masahito Ohue, Takashi Ishida, Yutaka Akiyama. “ESPRESSO: An ultrafast compound pre-screening method based on compound decomposition”, *The 27th International Conference on Genome Informatics (GIW 2016)*, 2016/10.

## 著書

29. 田中 成典, 広川 貴次, 池口 満徳 監修, 「インシリコ創薬 計算創薬の基礎から実例まで」 森北出版, 2025. (第 10 章「タンパク質立体構造を用いたドッキング計算」担当)
30. 金森 敬文 監訳, 「データサイエンスと機械学習 理論から Python による実装まで」 東京化学同人, 2022. (第 8 章「決定木とアンサンブル法」担当)

## 特許

31. 秋山 泰, 大上 雅史, **柳澤 溪甫**, 吉川 寧, 杉田 昌岳, 藤江 拓哉, 杉山 聡, 村田 翔太郎. “予測装置、学習済みモデルの生成装置、予測方法、学習済みモデルの生成方法、予測プログラム、及び学習済みモデルの生成プログラム”, 特許 7057004, 2022/4.
32. 秋山 泰, 大上 雅史, **柳澤 溪甫**, 吉川 寧, 李 佳男. “予測装置、学習済みモデルの生成装置、予測方法、学習済みモデルの生成方法、予測プログラム、及び学習済みモデルの生成プログラム”, 特許 7057003, 2022/4.
33. 秋山 泰, 大上 雅史, **柳澤 溪甫**, 吉川 寧. “情報処理装置、情報処理方法、情報処理プログラム、及び情報処理システム”, 特願 2021-23750, 2021/2.
34. 秋山 泰, 大上 雅史, **柳澤 溪甫**, 吉川 寧. “情報処理装置、情報処理方法、情報処理プログラム、及び情報処理システム”, 特願 2020-189856, 2020/11. (国内優先権主張)