

## 履歴書

氏名

坂牧 隆司 Ryuji Sakamki

職歴

2015.4- 株式会社クロスアビリティ

2012.4-2015.3 住友ゴム工業株式会社 研究員

2009.4-2012.3 日本学術振興会 特別研究員 DC1

学歴

2009.4-2012.3 慶應義塾大学大学院 理工学研究科開放環境科学専攻 博士(工学)

2010.5-2011.4 Colorado School of Mines, Visiting Scholar

2007.4-2009.3 慶應義塾大学大学院 理工学研究科開放環境科学専攻 修士

2003.4-2007.3 慶應義塾大学 理工学部機械工学科 学士

受賞歴

1. 2007.11 分子シミュレーション研究会主催 第 21 回分子シミュレーション討論会 学生優秀発表賞, "ビデオゲーム用ハードウェアを用いた高速分子動力学シミュレーション".
2. 2011.12 分子シミュレーション研究会主催 第 25 回分子シミュレーション討論会 学生優秀発表賞, "Direct Coexistence 法を用いた固液または気液平衡の分子シミュレーション".

公刊論文

1. Rio Yokota, Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Shinnosuke Obi and Kenji Yasuoka, "Fast multipole methods on a cluster of GPUs for the Meshless simulation of turbulence", Computer Physics Communications, 180, 11, (2009), 2066-2078.
2. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "グラフィックカードを用いた水表面張力の高速分子動力学シミュレーション", 情報処理学会論文誌. コンピューティングシステム, 2, 2, (2009), 89-97.
3. Hun Joo Myung, Ryuji Sakamaki, Kwang Jin Oh, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka

- and Sik Lee, "Accelerating molecular dynamics simulation using graphics processing unit", Bulletin of the Korean Chemical Society, 31, (2010), 3639-3643.
4. Tetsu Narumi, Tsuyoshi Hamada, Keigo Nitadori, Ryuji Sakamaki and Kenji Yasuoka, "Fast quasi double-precision method with single-precision hardware to accelerate scientific applications", International Journal of Computational Methods, 8, (2011), 561.
  5. Ryuji Sakamaki, Amadeu K. Sum, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Molecular dynamics simulations of vapor/liquid coexistence using the nonpolarizable water models", Journal of Chemical Physics, 134, (2011), 124708.
  6. Ryuji Sakamaki, Amadeu K. Sum, Tetsu Narumi, Ryo Ohmura and Kenji Yasuoka, "Thermodynamic Properties of Methane/Water Interface Predicted by Molecular Dynamics Simulations", Journal of Chemical Physics, 134, (2011), 144702.

#### 招待講演

1. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "CUDA による高速分子動力学計算", Japan CUDAカンファレンス 2008, 東京, Mar. 6, (2008).
2. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "CUDA を用いた分子動力学シミュレーションの高速化", 平成 21 年第 1 回神戸シミュレーションスクール, 金沢, Sep. 29, (2009).
3. 坂牧 隆司, "住友ゴムにおける若手研究者の挑戦 ～タイヤの未来を切り拓くために～", 慶應義塾大学大学院政策・メディア研究科/理工学研究科グローバル環境システムリーダープログラム 2014 年度第 1 回 GESL セミナー, 横浜, Apr. 24, (2014).
4. 坂牧 隆司, 尾藤 容正, 多田 俊生, 岸本 浩通, 増渕 雄一, "京コンピュータを用いた大規模粗視化分子動力学シミュレーションの検討", 高分子計算機科学研究会, 東京, Mar. 6, (2013).
5. 坂牧 隆司, "タイヤ用ゴムの開発における分子シミュレーションの適用", J-OCTA ユーザ会議 2013, 東京, Oct. 22, (2013).
6. 坂牧 隆司, "GUI 支援ソフト Winmostar と LAMMPS を用いた溶媒和自由エネルギーの算出", 第 1 回「京」における材料系ワークショップ, 東京, Feb. 19, (2016).

#### 解説記事

1. 坂牧 隆司, "水・メタン系の相平衡の分子動力学シミュレーション", アンサンブル, 16, 4 (2014), 242-246.
2. 坂牧 隆司, "GPU を使った古典分子動力学シミュレーションの高速化", アンサンブル

ル, 14, 2 (2012), 76-80.

#### 特許

1. 特許公開 2015-079450, “複合材料のシミュレーションモデルの作成方法” .
2. 特許公開 2015-094750, “高分子材料のシミュレーション方法” .
3. 特許公開 2015-102972, “粒子集団の座標を定義する方法” .
4. 特許公開 2016-009458, “高分子材料モデル作成方法” .
5. 特許公開 2016-081297, “高分子材料のシミュレーション方法” .

#### 研究費

- 2010.5-2011.4 日本学術振興会 優秀若手研究者海外派遣事業

#### 国際学会発表

1. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Makoto Taiji and Kenji Yasuoka, "Special-Purpose Computers and Video-Game Consoles as a High Performance Computing Platform for Molecular Dynamics Simulation", The 9th High Performance Computing International Conference , Seoul, Korea, Sep. 9-13, (2007).
2. Ryuji Sakamaki, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Large Scale Molecular Dynamics Simulation using Graphic Processing Unit", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials, Tokyo, Japan, Jun. 18-20, (2008). (Poster)
3. Shun Kameoka, Ryuji Sakamaki, Toshiki Mima, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Acceleration of molecular dynamics simulation of liquid crystals", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials, Tokyo, Japan, Jun. 18-20, (2008).
4. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Rio Yokota, Shinnosuke Obi and Kenji Yasuoka, "Using Special-Purpose and Video-Game Computers for Accelerating Particle Based Simulations", International Symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials, Tokyo, Japan, Jun. 18-20, (2008).
5. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka and Kenji Yasuoka, "Using Special-Purpose and Video-Game Computers for Accelerating Molecular Dynamics Simulations", 3rd International Workshop MSSMBS'08, Dubna, Russia, Sep. 10-12, (2008).

6. Ryuji Sakamaki, Ryo Ohmura, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Molecular Dynamics Simulation of water/methane Interface", 15th International Conference on Properties of Water and Steam, Berlin, Germany, Sep. 7-11, (2008). (Oral)
7. Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka and Kenji Yasuoka, "Overheads in Accelerating Molecular Dynamics Simulations with GPUs", The Ninth International Conference on Parallel and Distributed Computing Applications and Technologies (PD-CAT'08), Dunedin, New Zealand, Dec. 1-4, (2008).
8. Tetsu Narumi, Tsuyoshi Hamada, Keigo Nitadori, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka and Kenji Yasuoka, "High-Performance Quasi Double-Precision Method Using Single-Precision Hardware for Molecular Dynamics Simulations with GPUs", HPC Asia 2009, Kaohsiung, Taiwan, Mar. 2-5, (2009).
9. Rio Yokota, Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Shun Kameoka, Kenji Yasuoka and Shinnosuke Obi, "DNS of Homogeneous Turbulence Using Vortex Methods Accelerated by the FMM on a Cluster of GPUs", Parallel Computational Fluid Dynamics (ParCFD) 2009, California, USA, May. 18-22, (2009).
10. Ryuji Sakamaki, Ryo Ohmura, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Calculation of Thermodynamics Properties on Methane/Water Interface Using Fast Molecular Dynamics Simulation", The third Mini-Symposium on Liquids, Okayama, Japan, Jun. 20, (2009). (Poster)
11. Rio Yokota, Tetsu Narumi, Ryuji Sakamaki, Kenji Yasuoka and Shinnosuke Obi, "Fast Multipole Methods on GPUs for the Meshfree Simulation of Turbulence", 10th US National Congress on Computational Mechanics, Ohio, USA, Jul. 16-19, (2009).
12. Ryuji Sakamaki, "Accelerating Molecular Simulations for the Study of Clathrate Hydrate on Graphic Processing Units", The 2nd International Symposium on Symbiotic Safe and Secure System Design, Yokohama, Japan, Feb. 26, (2010). (Poster)
13. Hayato Aida, Ryuji Sakamaki, Fumihito Takeuchi, Ryo Ohmura, Amadeu K. Sum and Kenji Yasuoka, "Calculation of Phase Equilibrium Condition and Occupancy Ratio of Clathrate Hydrate by Gibbs Ensemble Monte Carlo", Clathrate Hydrates and Technology Innovations - Challenges Toward a Symbiotic Energy Paradigm, Yokohama, Japan, Mar. 15, (2010).
14. Ryuji Sakamaki, Ryo Ohmura, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Potential Model Dependency of Thermodynamical Properties on Methane/Water Interface", Clathrate Hydrates and Technology Innovations - Challenges Toward a Symbiotic Energy Paradigm, Yokohama, Japan, Mar. 15, (2010). (Poster)

15. Ryuji Sakamaki, Ryo Ohmura, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Accelerating molecular simulations to investigate the properties of clathrate hydrate by using Graphic Processing Units", Telluride Workshop on the Microscopic Description of Gas Clathrate, Telluride, USA, Jul. 12-16, (2010). (Oral)
16. Ryuji Sakamaki, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Accelerating Molecular Dynamics Simulation on GPGPU", 9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics, Sydney, Australia, Jul. 19-23, (2010). (Oral)
17. Kazuaki Takahashi, Ryuji Sakamaki, Rio Yokota, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "A combination of the Tree code and IPS method to simulate large scale systems by molecular dynamics", International Conference on Computational Science ICCS 2011, Singapore, Singapore, Jun. 1-3, (2011).
18. Ryuji Sakamaki, Amadeu K. Sum, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Phase equilibria for common water models", The 5th International Mini-Symposium on Liquids, Okayama, Japan, Jul. 25-26, (2011). (Poster)
19. Ryuji Sakamaki, Kenji Yasuoka, Eric M. Grzelak, David T. Wu, Ryo Ohmura and Amadeu K. Sum, "Calculation of interfacial tensions between hydrate and liquid phases using molecular simulation", 7th International Conference on Gas Hydrates ICGH7 2011, Edinburgh, Scotland, Jul. 17-21, (2011). (Poster)
20. Ryuji Sakamaki, Amadeu Sum, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Solid/liquid and liquid/vapor equilibria for common water models", 8th Liquid Matter Conference, Wien, Austria, Sep. 6-10, (2011). (Poster)
21. Ryuji Sakamaki, Rio Yokota, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "Accelerating Classical Molecular Simulations on a GPU cluster", The 2nd international symposium on Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials (MSBSM 2011), Kyoto, Japan, Sep. 10-12, (2011). (Poster)
22. Ryuji Sakamaki, "Direct coexistence simulations of water/ice and water/hydrate systems", The 4th International Symposia on Leading-Edge Research Activities for Global World, Yokohama, Japan, Feb. 24, (2012). (Poster)
23. Ryuji Sakamaki, Yasumasa Bito, Toshio Tada, Hiroyuki Kishimoto and Yuichi Masubuchi, "Large scale coarse-grained molecular dynamics simulations of rubber on the K computer", The 3rd AICS International Symposium, Kobe, Japan, Feb. 28, (2013).
24. Daisuke Takaiwa, Ryuji Sakamaki, Amadeu K. Sum, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "The melting point of hexagonal ice from the isobaric-isoenthalpic molecular dynamics simulation", 16th International Conference on the Properties

of Water and steam, London, UK, Sep. 4, (2013).

25. Daisuke Takaiwa, Ryuji Sakamaki, Amadeu K. Sum, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "The water model dependency of the melting point of hexagonal ice", International Symposium on Extended Molecular Dynamics and Enhanced Sampling: Nosé Dynamics 30 Years (NOSE30), Tokyo, Japan, Nov. 11, (2014).
26. Daisuke Takaiwa, Ryuji Sakamaki, Amadeu K. Sum, Tetsu Narumi and Kenji Yasuoka, "A study of the influence of the ice-face exposed to liquid water phase on the melting point of hexagonal ice by means of direct coexistence simulation of rigid water models", Global Environmental System Leaders (GESL) Workshop on Molecular Simulation, Yokohama, Japan, Mar. 17, (2015).
27. Masataka Oikawa, Ryuji Sakamaki, Yasumasa Bito, Shinichi Ueno, Masato Naito, Hiroyuki Kishimoto and Yuichi Masubuchi, "Large scale coarse-grained molecular simulations on fracture process of rubber", Pacificchem2015, Hawaii, USA, Dec. 15, (2015).

#### 国内学会発表

1. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "グラフィックカードを用いた高速分子動力学シミュレーション", 次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2007, 東京, Oct. 3-4, (2007). (ポスター発表)
2. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "ビデオゲーム用ハードウェアを用いた高速分子動力学シミュレーション", 第 21 回分子シミュレーション討論会, 金沢, Nov. 26-28, (2007). (ポスター発表)
3. 成見 哲, 坂牧 隆司, 梅津 亮, 小西 史一, 泰地 真弘人, 泰岡 顕治, "専用・汎用アクセラレーターと KNOPPIX で楽しむ分子動力学シミュレーション", 並列生物情報処理イニシアティブ第 8 回シンポジウム, 東京, Nov. 29, (2007).
4. 亀岡 駿, 坂牧 隆司, 美馬 俊喜, 成見 哲, 泰岡 顕治, "専用・汎用計算機を用いた液晶の分子動力学シミュレーション", 第 45 回日本伝熱シンポジウム, 筑波, Jun. 21-23, (2008).
5. 坂牧 隆司, 成見 哲, 大村 亮, 泰岡 顕治, "水気液界面の分子動力学シミュレーション", 第 29 回日本熱物性シンポジウム, 東京, Oct. 8-10, (2008). (口頭発表)
6. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "GPU を用いた大規模分子動力学シミュレーション", 第 21 回計算力学講演会, 沖縄, Nov. 1-3, (2008). (口頭発表)
7. 亀岡 駿, 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, "専用・汎用計算機による液晶の MD シミュレーション", 第 21 回分子シミュレーション討論会, 岡山, Nov. 17-19, (2008).
8. 横田 理央, 成見 哲, 坂牧 隆司, 亀岡 駿, 小尾 晋之介, 泰岡 顕治, "GPU 上で高速多

- 重 極法を用いた乱流のメッシュフリー解析” , 第 22 回数値流体力学シンポジウム, 東京, Dec. 17-19, (2008).
9. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, ”グラフィックカードを用いた水表面張力の高速分子動力学シミュレーション” , HPCS2009, 東京, Jan. 22-23, (2009). (口頭発表)
  10. 成見 哲, 坂牧 隆司, 泰岡 顕治, ”分子動力学シミュレーションの GPU による高速化” , 第 14 回計算工学講演会, 東京, May 12-14, (2009).
  11. 坂牧 隆司, 大村 亮, 成見 哲, 泰岡 顕治, ”水/メタン気液界面の分子動力学シミュレーション” , 第 46 回伝熱シンポジウム, 京都, Jun. 2-4, (2009). (口頭発表)
  12. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, ”分子動力学シミュレーションにおける Particle Mesh Ewald 法の GPU への実装と評価” , 第 22 回計算力学講演会, 金沢, Oct. 10-12, (2009). (口頭発表)
  13. 坂牧 隆司, 成見 哲, 泰岡 顕治, ”CUDA を用いた分子間相互作用計算高速化ライブラリの評価および気液界面物性の計算” , 第 23 回分子シミュレーション討論会, 名古屋, Nov. 30-2, (2009). (ポスター発表)
  14. 坂牧 隆司, アマデウ スム, 成見 哲, 泰岡 顕治, ”様々な水モデルに対する気液および固液 界面の分子動力学シミュレーション” , 第 32 回日本熱物性シンポジウム, 東京, Nov. 21-23, (2011). (口頭発表)
  15. 坂牧 隆司, アマデウ スム, 成見 哲, 大村 亮, 泰岡 顕治, ”Direct Coexistence 法を用いた 固液または気 液平衡の分子シミュレーション” , 第 25 回分子シミュレーション討論会, 東京, Dec. 5-7, (2011). (ポスター発表)
  16. 野村昂太郎, 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "GPU を用いたレプリカ交換分子動力学シミュレーションの高速化", 第 17 回計算工学講演会, 京都, May 29, (2009).
  17. 高岩 大輔, 坂牧 隆司, アマデウ スム, 成見 哲, 泰岡 顕治, “剛体水モデルにおける水/氷共存状態の分子動力学シミュレーション”, 第 26 回分子シミュレーション討論会, 福岡, Nov. 26-28, (2012).
  18. 坂牧 隆司, 岸本 浩通, “粗視化分子動力学法を用いたゴムの大規模シミュレーション“, 平成 24 年度 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会, 東京, Mar. 14, (2013). (口頭発表)
  19. 坂牧 隆司, 岸本 浩通, “京を利用した大規模分子シミュレーションによるタイヤ材料開発 “, 平成 25 年度 「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会, 東京, Oct. 2, (2013). (口頭発表)

#### セミナー

1. Ryuji Sakamaki, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, ”PME on GPU”, Prof. Martin Karplus' group, Harvard University, Boston, Jul. 25, (2008).

2. Ryuji Sakamaki, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Accelerating the molecular dynamics simulations with Graphics Processing Unit", KISTI Supercomputing Center, Daejeon, Korea, Jul. 3, (2009).
3. 坂牧隆司, 成見哲, 泰岡顕治, "GPU を用いた分子動力学シミュレーションの高速化", 東京工業大学大学院情報理工学研究科計算工学専攻秋山研究室, 2009年7月16日.
4. Ryuji Sakamaki, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Accelerating Various Molecular Simulations on a GPU Cluster", KISTI Supercomputing Center, Daejeon, Korea, Feb. 24, (2010).
5. Ryuji Sakamaki, Tetsu Narumi, Kenji Yasuoka, "Developing molecular simulation code on a GPU", Colorado School of Mines, Golden, US, Jun. 3, (2010).
6. 坂牧隆司, "水単成分系及び水/メタン系における相平衡の分子動力学シミュレーション", 関西レオロジー研究会 2013年度若手講演会, 豊中, Dec. 16, (2013).
7. 坂牧隆司, 松林伸幸, 第24回CMSI神戸ハンズオンERmodチュートリアル, 計算物質科学イニシアティブ, Jun. 12, (2015).

以上