

# Abstracts

**Mathew D. Halls**

Senior Vice President  
Materials Science  
Schrödinger

## Accelerating Materials Development with Physics and AI: New Capabilities for Consumer Goods and Chemical Applications in the Schrödinger MS Platform

### 物理学とAIによる材料開発の加速: Schrödinger MSプラットフォームにおける消費財および化学アプリケーション向けの新機能

Schrödinger is enabling the next generation of high performance materials and formulations, accelerating discovery and deployment by seamlessly integrating physics-based simulations with advanced AI. Our unified platform moves beyond incremental experimental iteration to provide efficient, targeted evaluation of materials and formulations across vast design spaces. This presentation showcases key platform enhancements across quantum mechanics (QM), molecular dynamics (MD), and machine learning (ML/AI), underscoring our scientific and engineering leadership position. Key advancements include:

- Generative AI & Accelerated Discovery: Implementation of the REINVENT method (a generative model with multi-objective reinforcement learning) to efficiently discover novel and synthetically viable high-performance materials.
- Advanced Simulation Coverage and Accuracy: Significant enhancements to MPNICE, our charge-aware machine learning force field (MLFF), which now enables highly accurate simulations for larger-scale models.
- AI for Complex Devices: Continued extension of our AI framework to predict performance for complex multicomponent layered devices, such as tandem OLEDs and other challenging device architectures.

We will also share our vision for the future, including agentic AI-driven simulations that automate and optimize entire in silico project workflows, alongside new MLFF developments, and automated reactivity tools leveraging GPU-accelerated QM. Attendees will see how these powerful new features and capabilities translate into breakthrough applications for the consumer goods and chemical industries.

Schrödingerは、物理ベースのシミュレーションと高度なAIをシームレスに統合することで、次世代の高性能材料と製剤の開発を可能にし、発見と展開を加速させています。当社の統合プラットフォームは、漸進的な実験の繰り返しを超え、広大な設計空間にわたる材料や製剤の効率的かつターゲットを絞った評価を提供します。本プレゼンテーションでは、量子力学 (QM)、分子動力学 (MD)、機械学習 (ML/AI) にわたるプラットフォームの主要な強化点を紹介し、科学およびエンジニアリングにおける当社のリーダーシップの地位を強調します。主な進歩は以下の通りです：

- 生成AIと発見の加速：REINVENTメソッド（多目的強化学習を備えた生成モデル）の実装により、新規かつ合成可能な高性能材料を効率的に発見します。
- 高度なシミュレーションの適用範囲と精度の向上：電荷を考慮した機械学習フォースフィールド (MLFF) であるMPNICEの重要な強化により、より大規模なモデルに対して非常に正確なシミュレーションが可能になりました。
- 複雑なデバイス向けのAI：タンデムOLEDやその他の困難なデバイスアーキテクチャなど、複雑な多成分層状デバイスの性能を予測するためのAIフレームワークの継続的な拡張を行っています。

また、プロジェクト全体のワークフローを自動化および最適化するエージェントAI駆動のシミュレーション (in silico)、新しいMLFFの開発、GPU加速QMを活用した自動反応性ツールなど、将来のビジョンについても共有します。参加者の皆様には、これらの強力な新機能が消費財および化学産業における画期的なアプリケーションにどのように結びつくかをご覧ください。

## Jeff Sanders

Director, Global Portfolio  
Leader  
Schrödinger

## The Future of Food R&D: Predicting Formulation, Function, and Safety via Molecular Simulation

### 食品R&Dの未来：分子シミュレーションによる配合、機能性、安全性の予測

The Food and Beverage (F&B) industry is evolving rapidly to meet consumer demands for functional, natural, and safe products. However, traditional trial-and-error R&D is often too slow and resource-intensive to keep pace. This presentation demonstrates how Schrödinger's atomistic-level simulation platform transforms F&B product development by replacing guesswork with massive-scale, predictive, physics-based insights and advanced machine learning.

This talk will highlight how computational chemistry and AI are driving breakthrough efficiency across four critical areas of F&B research:

**Functional Ingredients & Bioactives:** By computationally screening health-promoting compounds against specific molecular targets, we accelerate the rational design, rapid discovery, and optimization of functional ingredients, significantly reducing early-stage R&D risk.

**Natural Colorants & Stability:** Simulating the complex degradation pathways of natural pigments empowers formulators to accurately predict color stability and safety profiles. This provides a reliable framework for creating vibrant, clean-label products with extended shelf life.

**Texture & Lipid Engineering:** Molecular modeling of complex fats, such as cocoa butter, unlocks the rapid exploration of diverse fat formulations and the stability of fat crystals. This structural insight provides a quantitative basis for optimizing tempering processes, improving mouthfeel, and engineering bloom-resistant confectioneries.

**Food-Contact Packaging Interactions:** By modeling polymer systems, we can accurately predict how flavors, additives, and contaminants migrate between food and packaging materials. This physics-based approach ensures product integrity, prevents flavor scalping, and streamlines regulatory compliance for global markets. Attendees will leave equipped with a clear roadmap for integrating molecular-level modeling and AI into their own workflows—accelerating time-to-market and transforming how they design sustainable, safe, and consumer-winning formulations.

食品・飲料 (F&B) 業界は、機能性、天然由来、そして安全な製品を求める消費者の声に応えるため、急速に進化しています。しかし、従来の試行錯誤による研究開発は、多くの場合時間がかかりすぎ、十分なペースを維持することが困難です。本講演では、Schrödingerの原子レベルのシミュレーションプラットフォームが、推測を大規模かつ予測的で物理学に基づく知見と高度な機械学習に置き換えることで、F&B製品開発をどのように変革するかを示します。

本講演では、計算化学とAIがF&B研究の4つの重要な分野において、どのように画期的な効率化を推進しているかに焦点を当てます。

**機能性成分と生理活性物質:** 健康増進化合物を特定の分子標的に対して計算機上でスクリーニングすることにより、機能性成分の合理的な設計、迅速な発見、および最適化を加速させ、初期段階の研究開発リスクを大幅に軽減します。

**天然色素と安定性:** 天然色素の複雑な分解経路をシミュレーションすることで、配合設計者が色調の安定性と安全性プロファイルを正確に予測できるよう強力に支援します。これにより、賞味期限の長い、鮮やかでクリーンラベルな製品を開発するための信頼性の高いフレームワークが提供されます。

**食感と脂質エンジニアリング:** カカオバターなどの複雑な脂質の分子モデリングにより、多様な油脂配合の探索と脂肪結晶の安定性の評価を迅速に行うことが可能になります。この構造的知見は、テンパリングプロセスの最適化、口当たりの改善、および耐ブルーム性を備えた菓子類の設計のための定量的な基盤を提供します。

**食品接触パッケージの相互作用:** ポリマーシステムをモデル化することで、フレーバー、添加物、汚染物質が食品とパッケージ材料間でどのように移行するかを正確に予測できます。この物理学に基づくアプローチは、製品の品質を保証し、フレーバースカルピング（香りの吸着）を防ぎ、グローバル市場における規制遵守プロセスを合理化します。

参加者の皆様には、分子レベルのモデリングとAIを自社のワークフローに統合し、市場投入までの時間を短縮し、持続可能で安全、かつ消費者に選ばれる配合の設計方法を変革するための明確なロードマップをお持ち帰りいただきます。

## Anand Chandrasekaran

Product Manager, ML/AI  
for Materials Science  
Schrodinger

### Data-Driven Formulation Design: Accelerating Chemical and CPG R&D with Machine Learning and Generative AI

#### データ駆動型製剤設計：機械学習と生成AIによる化学・CPG分野の研究開発加速

The Chemical and Consumer Packaged Goods (CPG) industries rely heavily on complex formulations, but traditional trial-and-error optimization is slow and costly. This presentation explores how Schrödinger's Formulation Machine Learning and Optimization workflows map chemical structures and manufacturing conditions directly to physical properties, autonomously suggesting the next best experiment to accelerate product development.

We will highlight three specific MS Maestro case studies demonstrating these capabilities across different chemical spaces. First, we will show how Formulation ML successfully optimized the viscosity, turbidity, and stability of multi-component shampoo mixtures, including the capability to handle proprietary supplier materials lacking exact chemical structures. Second, we will illustrate the design of heterogeneous catalysts by simultaneously optimizing catalyst ingredients and macroscopic experimental conditions, such as temperature and pressure, to maximize performance. Third, we will present a case study accurately predicting the glass transition temperature (T<sub>g</sub>) of binary copolymer systems. Finally, to push beyond known chemical spaces, we will showcase REINVENT, a generative AI tool that enables the de novo inverse design of novel molecules tailored to specific physical property targets using reinforcement learning.

化学業界およびCPG（消費財）業界では、複雑な製剤設計が重要な役割を担っています。しかし、従来の試行錯誤型の最適化プロセスは、多大な時間とコストを必要としていました。本講演では、SchrödingerのFormulation Machine LearningおよびOptimizationワークフローを活用し、化学構造や製造条件を物性値と直接関連づけることで、「次に行うべき最適な実験」を自律的に提案し、製品開発を加速させるアプローチをご紹介します。

本講演では、これらの機能を異なる材料系で実証した、MS Maestroによる3つのケーススタディを取り上げます。まず、Formulation MLを用いて、多成分シャンプー配合における粘度、濁度、安定性の最適化に成功した事例をご紹介します。この事例では、正確な化学構造情報を持たないサプライヤー独自材料にも対応可能であることを示します。次に、不均一系触媒の設計事例として、触媒成分に加え、温度や圧力といったマクロな実験条件を同時に最適化し、触媒性能を最大化するアプローチをご紹介します。さらに、二元共重合体のガラス転移温度（T<sub>g</sub>）を高精度に予測したケーススタディを紹介し、最後に、既知の材料空間を超えた分子設計を実現するため、強化学習を活用して特定の物性目標に適した新規分子をゼロから設計できる生成AIツール「REINVENT」をご紹介します。

## Andrea Browning

Senior Director – Polymers  
Schrödinger

## Polymer formulation development with predictive models using Schrödinger Materials Science Suite Schrödinger Materials Science Suiteによる予測モデルを活用したポリマー製剤開発

Innovation of polymeric materials means more than just innovation on monomers, complex formulations are key to the balancing of multiple properties. The computational solutions available in the Schrödinger Materials Science Suite have been used to formulate polymer solutions leveraging a fundamental understanding of key structure-property relationships, as well as enhanced analysis capabilities. With the latest releases in 2026, improvements in reaction prediction, machine learning and coarse grained simulation provide polymer researchers with full multiscale prediction capabilities for polymer formulations. This presentation will describe these new solution workflows and show how they are enabling improved design for polymers and complex formulations.

高分子材料のイノベーションは、単にモノマー設計の革新だけではなく、複雑な配合設計によって複数の物性を最適にバランスさせることが重要です。Schrödinger Materials Science Suiteに搭載された計算科学ソリューションは、構造-物性に関する基礎的理解と高度な解析機能を活用し、ポリマー溶液の配合設計に活用されています。2026年の最新リリースでは、反応予測、機械学習、粗視化シミュレーションの機能がさらに強化され、ポリマー研究者はポリマーの配合に対する包括的なマルチスケール予測を実現できるようになりました。本講演では、これらの新しいワークフローをご紹介しますとともに、それらがポリマーおよび複雑なポリマー配合の設計高度化にどのように貢献しているかを解説します。

## Pavel A. Dub

Scientific Lead and  
Product Manager for  
Catalysis and Reactivity  
Schrödinger

## Automated Solutions for Degradation, Reactivity and Catalysis

### 分解・反応性・触媒研究のための自動化ソリューション

Understanding degradation pathways, chemical reactivity, and catalytic mechanisms is essential for the rational design of molecules and processes across pharmaceuticals, materials science, and catalysis. However, computational approaches in this area are still either underdeveloped or remain time-consuming and require significant expertise. In this presentation, we highlight recent advances in **automated, end-to-end solutions** for studying degradation, reactivity, and catalysis. These approaches combine **enhanced-sampling molecular dynamics** on computationally efficient potential energy surfaces (e.g., xTB, MLFFs) with **automated reaction event discovery, transition state search, and reaction network enumeration**. Together, these capabilities enable rapid and unbiased exploration of reaction mechanisms, supporting **mechanism-guided reactivity optimization and catalyst design** through high-throughput screening with minimal manual intervention.

分解経路、化学反応性、触媒機構の理解は、医薬品、材料科学、触媒分野における分子やプロセスの合理的設計に不可欠です。しかし、この分野における計算科学アプローチは、依然として十分に成熟していない、あるいは多くの時間と高度な専門知識を必要とするという課題があります。本講演では、分解、反応性、触媒研究を対象とした最新の自動化エンドツーエンドソリューションをご紹介します。これらのアプローチでは、計算効率に優れたポテンシャルエネルギー面（xTB、MLFFなど）上での拡張サンプリング分子動力学と、自動反応イベント探索、遷移状態探索、反応ネットワーク列挙を組み合わせています。これらの機能により、反応機構を迅速かつバイアスなく探索することが可能となり、最小限の手動操作で、高スループットスクリーニングによる反応性最適化や触媒設計を、反応機構に基づいて支援します。