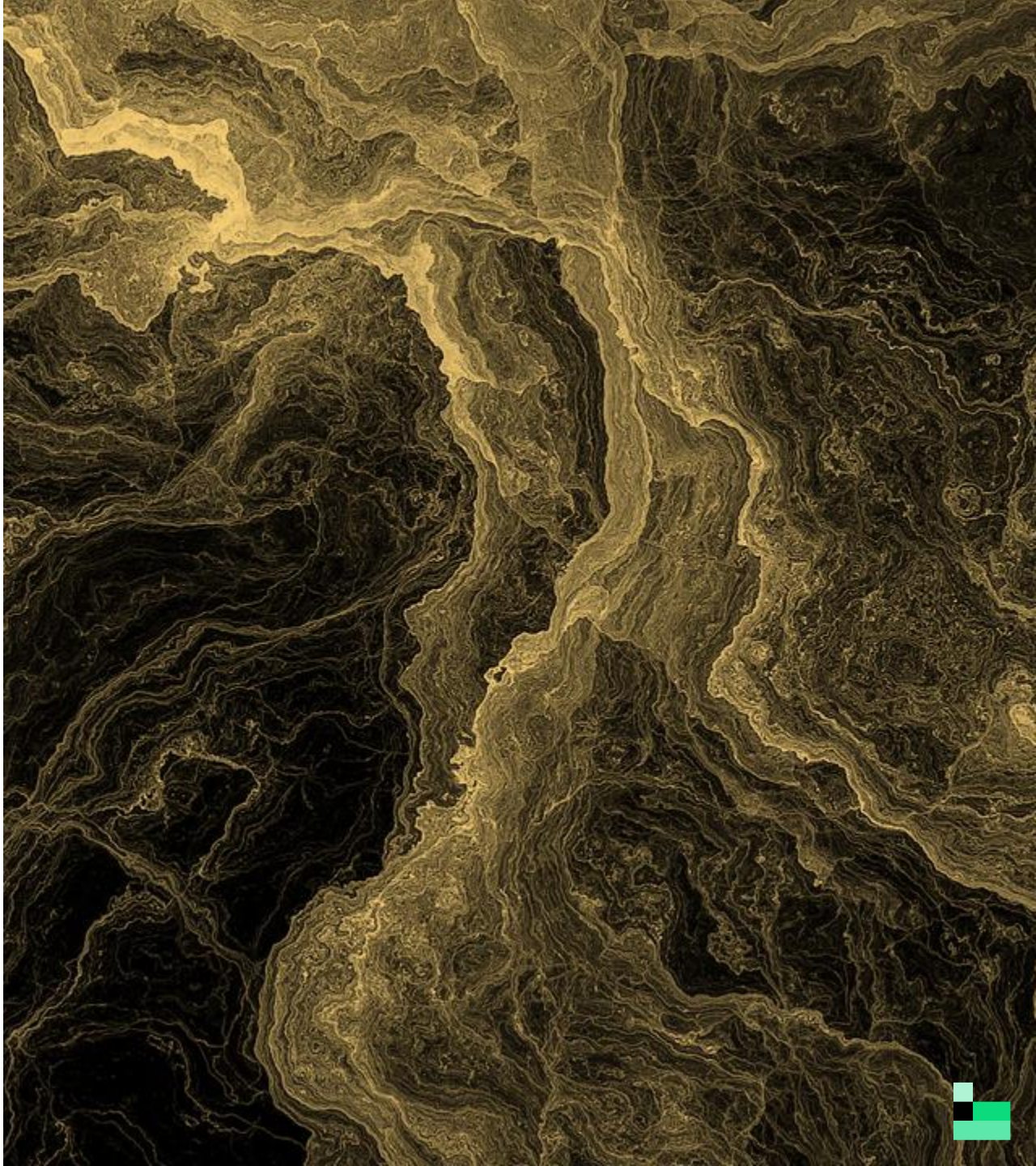




KI-News

Allgemein und in Material Science



Allgemeine KI-News: Overview

KI wird reguliert und geopolitisch sensibel:

Die Aussetzung von Fable/Mythos durch politischen Druck.

Hardware/Chips wird strategischer.

<https://www.anthropic.com/news/claude-fable-5-mythos-5?utm>



KI wird agentisch (Chatbots → KI-Agenten):

Codex, Claude Opus 4.8 und ähnliche Systeme zielen auf ausführende Arbeitsprozesse, nicht nur auf Chat.

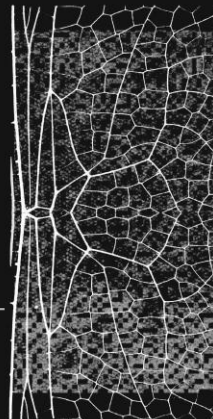
<https://www.anthropic.com/research/claude-code-expertise>
<https://openai.com/de-DE/index/codex-for-every-role-tool-workflow/>
<https://www.deeplearning.ai/the-batch/issue-357>



KI wandert in kritische Domänen:

Cybersecurity, Medizin, Chemie und Life Sciences werden konkrete Einsatzfelder.

<https://www.anthropic.com/news/expanding-project-glasswing>
<https://the-decoder.de/anthropic-weitet-project-glasswing-auf-200-partner-aus-um-kritische-infrastruktur-mit-ki-auf-sicherheitsluecken-zu-scannen/>
<https://openai.com/de-DE/news/research/>
<https://openai.com/de-DE/news/product-releases/>



Kosten, Infrastruktur und Abhängigkeiten werden entscheidend:

Wer KI produktiv einsetzt, muss Anbieter-, Cloud-, Daten- und Verfügbarkeitsrisiken bewerten.

<https://the-decoder.de/ki-forscher-yann-lecun-warnt-vor-grosser-blasenexplosion-in-der-ki-branche>
<https://the-decoder.de/china-plant-295-milliarden-dollar-fuer-landesweites-ki-rechenzentrumsnetz-nvidia-und-amd-bleiben-aussen-vor/>



Frontier-Modelle werden sicherheits- und geopolitisch reguliert

Frontier-KI wird mehr als sicherheits- und geopolitisch relevante Technologie behandelt

Hintergrund: Anthropic stellte Fable 5 als allgemein nutzbare, abgesicherte Mythos-Version vor. Mythos 5 sollte für Cyberdefender und Infrastrukturpartner mit weniger Einschränkungen verfügbar sein. Kurz darauf meldete Anthropic aber, dass der Zugriff auf Fable 5 und Mythos 5 wegen einer US-Regierungsanordnung ausgesetzt wird.

Bedeutung: Ein Modell kann technisch verfügbar sein, aber regulatorisch oder politisch nicht nutzbar bleiben. Für Unternehmen wird Modellverfügbarkeit damit Teil des Risikomanagements.

Folgen: Keine kritischen Prozesse auf genau ein Modell oder einen Anbieter bauen. Exit-Strategie, Datenexport, Zweitmodell und Rollen-/Zugriffskonzept gehören in jede KI-Strategie.



Hardware, Chips und KI-Infrastruktur werden strategischer

Hintergrund: OpenAI-Chipentwickler wechseln zu Anthropic. Der Wechsel fällt in eine Phase, in der beide Unternehmen ihre Kapitalmarktstrategie vorbereiten und Anthropic eigene Chips-Herstellung erwägen soll. Zusätzlich gibt es Berichte über Chinas Plan zu einem großen landesweites KI-Rechenzentrumsnetz, bei dem Nvidia und AMD außen vor bleiben sollen.

Bedeutung: KI ist nicht nur Software. Die strategische Kontrolle über Chips, Rechenzentren, Energie und Lieferketten wird ein zentraler Wettbewerbsfaktor.

Folgen: Europa bleibt bei KI-Infrastruktur stark abhängig. Lokale oder europäische KI-Angebote können mittelfristig aus Datenschutz- und Resilienzgründen wichtiger werden.



KI-Governance und Politik werden zum Dauerthema

Hintergrund: Anthropic veröffentlichte im Juni politische Vorschläge unter dem Titel „Policy on the AI Exponential“. Das Unternehmen argumentiert, dass KI sich schneller entwickle als klassische politische Prozesse. OpenAI veröffentlichte im gleichen Zeitraum Beiträge zu industrieller KI-Politik, Biodefense und ausländischen Einflussoperationen in KI-Debatten.

Bedeutung: Die großen KI-Unternehmen versuchen zunehmend, die politische Rahmensetzung aktiv mitzugestalten. Das betrifft Sicherheit, Exportkontrollen, Cybersecurity, Biodefense, Forschung und industrielle Wettbewerbsfähigkeit.

Folgen: KI-Governance wird nicht optional bleiben. Dokumentation, Risikobewertung, Zugriffskontrolle, Datenschutzprüfung und Nachvollziehbarkeit werden zunehmend Teil des normalen KI-Einsatzes.



Agentic AI und Coding-Agenten werden zum Hauptschlachtfeld

Hintergrund: OpenAI hat Anfang Juni „Codex for every role, tool, and workflow“ veröffentlicht und positioniert Codex stärker als universellen Arbeits- und Coding-Agenten. Parallel meldete Anthropic mit Claude Opus 4.8 ein Modell-Upgrade mit stärkerer Leistung bei Coding, agentischen Aufgaben und länger laufender professioneller Arbeit.

Bedeutung: Die Entwicklung geht weg vom reinen Chatbot hin zu Systemen, die Aufgabenketten ausführen: Code schreiben, Daten analysieren, Tickets bearbeiten, Dokumente durchsuchen, Workflows steuern.

Folgen: Wahrscheinlich der wichtigste praktische Trend. KI ist nicht mehr nur als „Textgenerator“, sondern kann zur Workflow-Automatisierung mit Risiko- und Qualitätsmanagement genutzt werden.



Anthropic erweitert KI-Cybersecurity-Projekt „Glasswing“

Hintergrund: Anthropic hat Project Glasswing ausgeweitet. Laut Anthropic sollen rund 150 neue Organisationen hinzukommen. Das Projekt nutzt Claude Security, um Codebasen auf Schwachstellen zu scannen. Anthropic verweist darauf, dass Partner bereits mehr als 10.000 schwerwiegende oder kritische Sicherheitslücken gefunden hätten.

Bedeutung: KI wird im Cybersecurity-Bereich nicht nur für Angriffsszenarien diskutiert, sondern zunehmend als Defensivwerkzeug zur Schwachstellensuche eingesetzt.

Folgen: Für Softwareprodukte, Maschinensteuerung, Webshops oder Kundendatenbanken wird KI-gestütztes Vulnerability-Scanning zunehmend relevant. Gleichzeitig bleibt die Frage offen, welche Daten dabei an externe KI-Anbieter gehen.



KI in Medizin, Life Sciences und Chemie gewinnt an Substanz

Hintergrund: OpenAI veröffentlichte im Juni mehrere Beiträge im Bereich Life Sciences, darunter LifeSciBench, sowie Arbeiten zu einem nahezu autonomen KI-Chemiker für Reaktionsoptimierung in der medizinischen Chemie. Außerdem veröffentlichte OpenAI einen Beitrag zur Verbesserung von Gesundheitsintelligenz in ChatGPT.

Bedeutung: KI-Anwendungen bewegen sich weiter von generischem Text hin zu domänenspezifischen wissenschaftlichen Workflows: Reaktionsoptimierung, Diagnostik, Benchmarks, Dateninterpretation.

Folgen: Für Materialwissenschaft, Polymerchemie und Prozessentwicklung ist das ein klares Signal: KI wird zunehmend in Labor- und Entwicklungsprozesse integriert – aber die Qualität hängt stark von Datengrundlage, Validierung und Fachwissen ab.



KI-Kosten und Geschäftsmodelle stehen unter Druck

Hintergrund: Berichte über Aussagen von Yann LeCun, der vor einer möglichen „Blasenexplosion“ in der KI-Branche warnt, wenn Anbieter wie OpenAI und Anthropic ihre Kosten nicht senken oder Preise erhöhen können. Die Meldung verweist darauf, dass KI-Dienste teuer im Betrieb sind und Nutzung teilweise durch Investoren subventioniert werde.

Bedeutung: Die KI-Branche steht vor einem Skalierungsproblem: Nutzer erwarten günstige oder kostenlose KI, aber Training, Inferenz, Chips, Strom und Rechenzentren sind extrem teuer.

Folgen: KI-Tools können teurer werden. Bei Tool-Auswahl sollte man nicht nur auf aktuelle Preise schauen, sondern auch auf Preisstabilität, Vertragslaufzeiten, Datenexport und Wechselbarkeit.

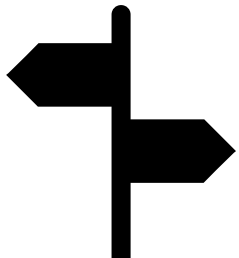


Allgemeine KI-News: Zusammenfassung



Zentrale Beobachtung:

Die News zeigen keinen isolierten Tool-Hype, sondern einen Strukturwechsel: KI wird agentischer, sicherheitskritischer, stärker reguliert und tiefer in Cloud-, Software- und Forschungsprozesse integriert.

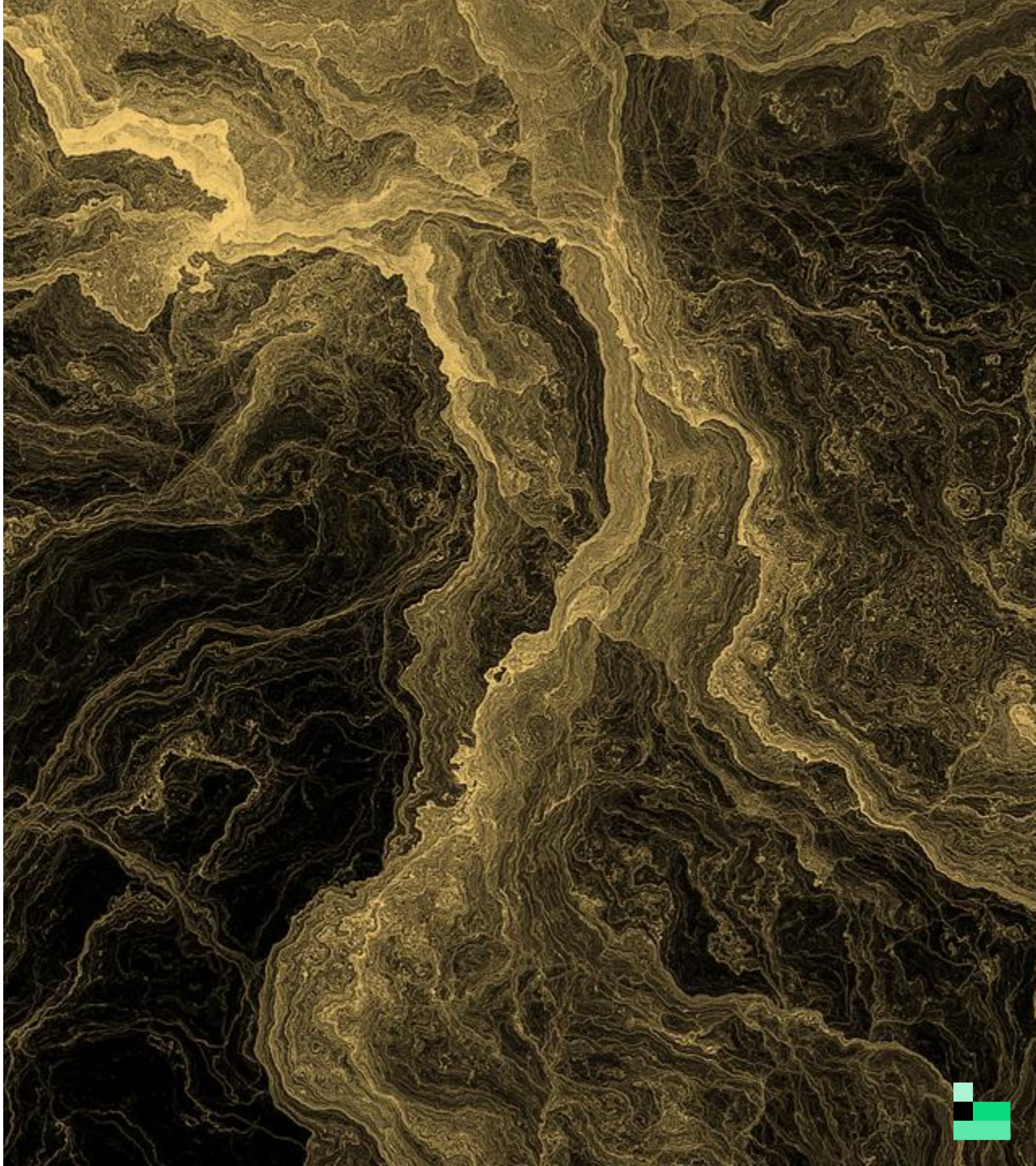


Konsequenz:

KI-Auswahl muss neben Leistung auch Datenrisiko, Modellverfügbarkeit, Kostenentwicklung, Auditierbarkeit und Exit-Fähigkeit berücksichtigen.



KI news in material science



npj | artificial intelligence Article

<https://doi.org/10.1038/s44387-026-00113-2>

polyRETRO: a language model approach to predict polymerization class and monomers for a target polymer

 Check for updates

Sakshi Agarwal, Wei Xiong & Rampi Ramprasad 

 ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY  Check for updates

[View PDF Version](#)

 Open Access Article

 This Open Access Article is licensed under a [Creative Commons Attribution-Non Commercial 3.0 Unported Licence](#)

DOI: [10.1039/D6DD000206D](https://doi.org/10.1039/D6DD000206D) (Paper) [Digital Discovery](#), 2026, Advance Article

ADEPT-PolyGraphMT: automated molecular simulation and multi-task multi-fidelity machine learning for polymer property generation and prediction

Sobin Alosious ^{ab}, Yuhua Liu ^c, Jiaxin Xu ^b, Gang Liu ^d, Renzheng Zhang ^b, Meng Jiang ^{ad} and Tengfei Luo ^{*abef}

Theorie und Entwicklung

arXiv > cs > arXiv:2606.02145  Search... Help

Computer Science > Machine Learning

[Submitted on 1 Jun 2026]

Hybrid Neural Ordinary Differential Equations for Data-Efficient Polymerization Modeling with Incomplete Kinetics

Marah Almanasreh, Alexander Mitsos, Eike Cramer

Article | [Open access](#) | Published: 23 March 2026

Determining the percentage of recycled plastic content in a plastic product

Yaoli Zhao, Charuvahan Adhivarahan, Chandra Lekha Jyothula, Karthik Dantu, Thomas Thundat & Amit Goyal 

[Communications Engineering](#) **5**, Article number: 51 (2026) | [Cite this article](#)

6022 Accesses | 46 Altmetric | [Metrics](#)

 INSPIRING PLASTICS PROFESSIONALS  POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE

RESEARCH ARTICLE |  Full Access

Real-Time Diagnosis of Polymer Compositions During Extrusion via Pressure Signals and Machine Learning

Seunghoon Kang, Young-Gu Kim, Kyung Hyun Ahn 

First published: 05 February 2026 | <https://doi.org/10.1002/pen.70407>  | [VIEW METRICS](#)

Praktische Anwendungen/Auswirkungen

KI News in material science,
May to June 2026

npj | artificial intelligence

Article



<https://doi.org/10.1038/s44387-026-00113-2>

polyRETRO: a language model approach to predict polymerization class and monomers for a target polymer

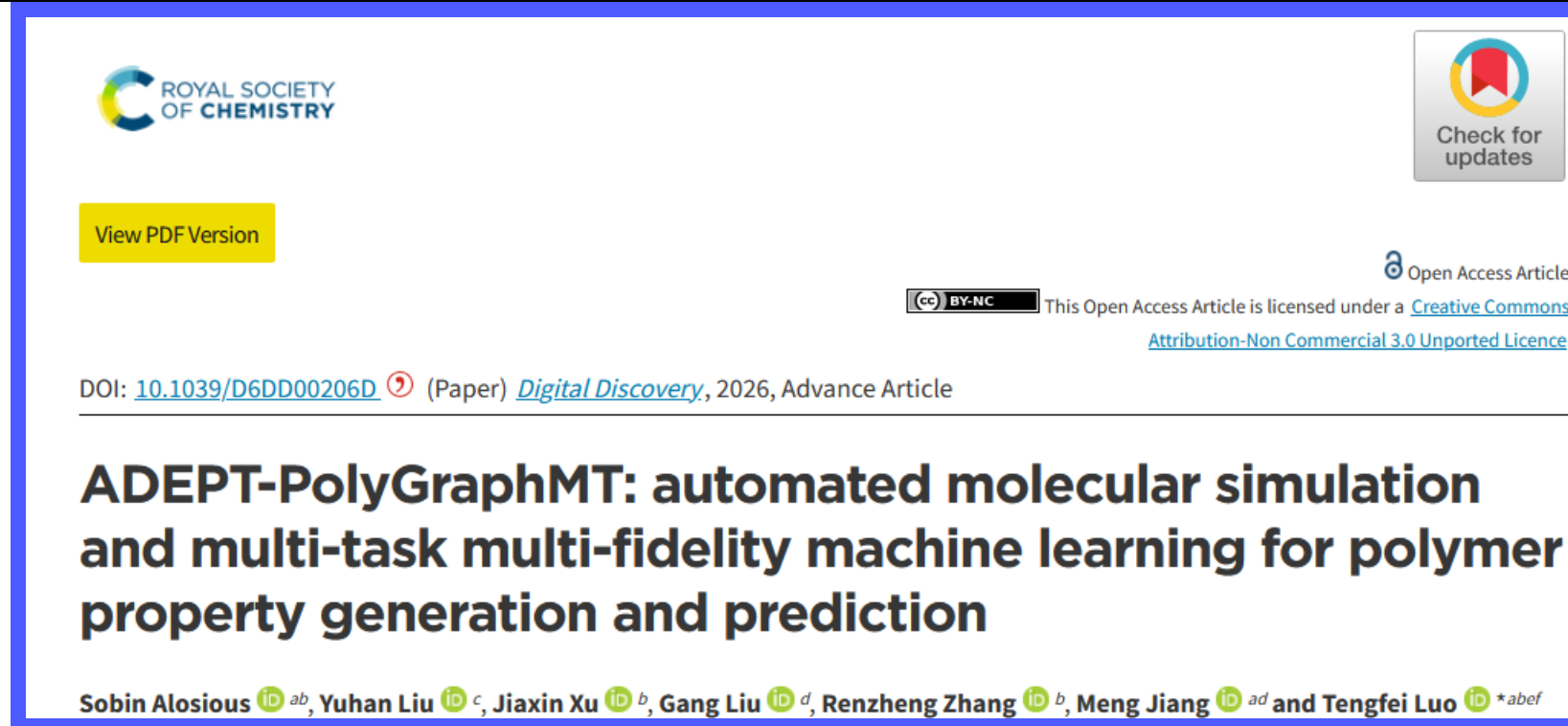
Check for updates

Sakshi Agarwal, Wei Xiong & Rampi Ramprasad

Predicts polymerization class and candidate monomers from a target polymer SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) using LLM-based retrosynthesis.

polyRETRO is an LLM-based polymer retrosynthesis approach: from the SMILES structure of a target polymer, it first predicts the likely polymerization class and then derives suitable reaction templates and monomers. Its goal is to bridge the gap between AI-generated polymer structures and experimentally synthesizable materials; the authors evaluated it on 11,245 polymerization pathways for 10,051 homopolymers.

KI News in material science, May to June 2026



The screenshot shows the top portion of a scientific article page. At the top left is the Royal Society of Chemistry logo. Below it is a yellow button labeled 'View PDF Version'. To the right is a 'Check for updates' button. Further right is the 'Open Access Article' badge. Below these is the Creative Commons license information: 'CC BY-NC' and 'This Open Access Article is licensed under a Creative Commons Attribution-Non Commercial 3.0 Unported Licence'. The DOI is '10.1039/D6DD00206D' (Paper) in *Digital Discovery*, 2026, Advance Article. The title is 'ADEPT-PolyGraphMT: automated molecular simulation and multi-task multi-fidelity machine learning for polymer property generation and prediction'. The authors are Sobin Alosious, Yuhan Liu, Jiaxin Xu, Gang Liu, Renzheng Zhang, Meng Jiang, and Tengfei Luo, with their ORCID iD icons and superscript letters.

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

View PDF Version

Check for updates

Open Access Article

CC BY-NC This Open Access Article is licensed under a Creative Commons Attribution-Non Commercial 3.0 Unported Licence

DOI: [10.1039/D6DD00206D](https://doi.org/10.1039/D6DD00206D) (Paper) *Digital Discovery*, 2026, Advance Article

ADEPT-PolyGraphMT: automated molecular simulation and multi-task multi-fidelity machine learning for polymer property generation and prediction

Sobin Alosious ^{ab}, Yuhan Liu ^c, Jiaxin Xu ^b, Gang Liu ^d, Renzheng Zhang ^b, Meng Jiang ^{ad} and Tengfei Luo ^{*abef}

Combines automated MD/DFT (molecular dynamics/density functional theory) workflows with multi-task and multi-fidelity graph ML across 28 polymer properties:

Automatically generated polymer property data using molecular simulations and quantum calculations to train a graph neural network model that can predict many polymer properties at once while accounting for the fact that the data come from sources of different reliability.

→ Given a repeat-unit SMILES, the framework tries to predict many useful polymer properties quickly, without running expensive simulations or experiments for every new polymer candidate.

npj | artificial intelligence Article

<https://doi.org/10.1038/s44387-026-00113-2>

polyRETRO: a language model approach to predict polymerization class and monomers for a target polymer

Check for updates

Sakshi Agarwal, Wei Xiong & Rampi Ramprasad

ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

View PDF Version

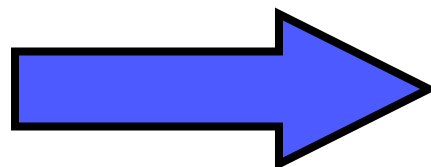
CC BY-NC This Open Access Article is licensed under a [Creative Commons Attribution-Non Commercial 3.0 Unported Licence](#)

DOI: [10.1039/D6DD00206D](https://doi.org/10.1039/D6DD00206D) (Paper) *Digital Discovery*, 2026, Advance Article

ADEPT-PolyGraphMT: automated molecular simulation and multi-task multi-fidelity machine learning for polymer property generation and prediction

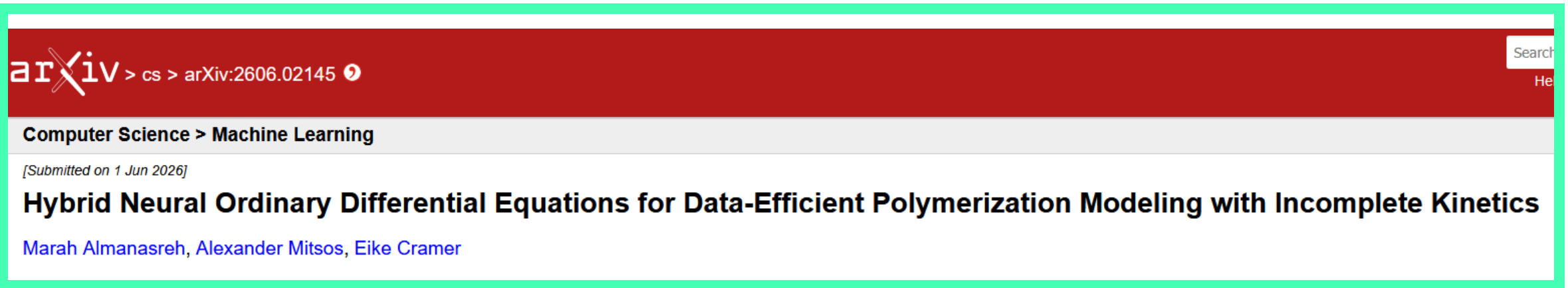
Sobin Alosious^{a,b}, Yuhao Liu^c, Jiaxin Xu^b, Gang Liu^d, Renzheng Zhang^b, Meng Jiang^{ad} and Tengfei Luo^{*abef}

Theorie und Entwicklung



SMILES used for
polymerization path and
property prediction

KI News in material science, May to June 2026



Open-source Python framework integrating DFTB+, Bayesian GNNs, and generative models for polymer design:

A hybrid Neural Ordinary Differential Equation (NODE) model for polymerization kinetics: instead of learning the full polymerization process purely from data, it keeps known mechanistic mass balances and learns only the poorly characterized part, namely the effective radical concentration controlling monomer consumption. Using free-radical polymerization of methyl methacrylate (MMA) as a case study, the hybrid model performs much better than purely data-driven neural models under sparse, noisy, and unseen operating conditions, showing that combining physical knowledge with machine learning can make polymerization modeling more data-efficient and more reliable.

KI News in material science, May to June 2026

Article | [Open access](#) | Published: 23 March 2026

Determining the percentage of recycled plastic content in a plastic product

[Yaoli Zhao](#), [Charuvahan Adhivarahan](#), [Chandra Lekha Jyothula](#), [Karthik Dantu](#), [Thomas Thundat](#) & [Amit Goyal](#) 

[Communications Engineering](#) **5**, Article number: 51 (2026) | [Cite this article](#)

6022 Accesses | **46** Altmetric | [Metrics](#)

Multi-modal deep learning classifier, a deep discriminator network (supervised classification model), to determine recycling content:

This paper presents a non-destructive, multi-modal sensing method to determine the percentage of recycled plastic in finished products by combining triboelectric measurements, dielectric/impedance spectroscopy, capacitance analysis, mid-infrared spectroscopy, and machine learning. Using PET samples with different recycled-content levels, the authors show that recycling-induced chain scission and defects create measurable electrical and spectroscopic signatures, enabling over 97% classification accuracy for 0–50% recycled PET content, which is highly relevant for quality control and regulatory compliance.

KI News in material science, May to June 2026



The banner features the SPE logo (a stylized 'spe' in a white cup shape) on the left, followed by the text 'INSPIRING PLASTICS PROFESSIONALS'. In the center is a white molecular structure icon on an orange background. To the right, the journal title 'POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE' is written in white capital letters.

RESEARCH ARTICLE |  Full Access

Real-Time Diagnosis of Polymer Compositions During Extrusion via Pressure Signals and Machine Learning

[Seunghoon Kang](#), [Young-Gu Kim](#), [Kyung Hyun Ahn](#) 

First published: 05 February 2026 | <https://doi.org/10.1002/pen.70407>  | [VIEW METRICS](#) 

Time-series machine-learning model, more specifically MultiRocket–Hydra with a linear classification/prediction model, which identifies the PP/PE composition from extrusion pressure:

This paper proposes an inline real-time method for diagnosing polymer blend composition during extrusion by training a machine-learning model on pressure signals, because these signals reflect processing conditions and the rheological behavior of the material. In the context of mechanical recycling, the approach can predict compositions in 10 wt.% increments with 96% accuracy using only 10 seconds of pressure data, enabling fast quality control and process adjustment with just a single pressure sensor.

arXiv > cs > arXiv:2606.02145

Computer Science > Machine Learning

[Submitted on 1 Jun 2026]

Hybrid Neural Ordinary Differential Equations for Data-Efficient Polymerization Modeling with Incomplete Kinetics

Marah Almanasreh, Alexander Mitsos, Eike Cramer

Article | [Open access](#) | Published: 23 March 2026

Determining the percentage of recycled plastic content in a plastic product

Yaoli Zhao, Charuvahan Adhivaran, Chandra Lekha Jyothula, Karthik Dantu, Thomas Thundat & Amit Goyal

Communications Engineering 5, Article number: 51 (2026) | [Cite this article](#)

6022 Accesses | 46 Altmetric | [Metrics](#)

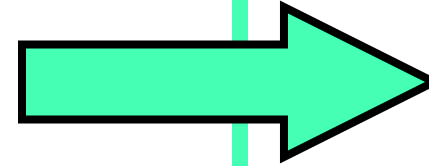
 INSPIRING PLASTICS PROFESSIONALS  POLYMER ENGINEERING AND SCIENCE

RESEARCH ARTICLE | [Full Access](#)

Real-Time Diagnosis of Polymer Compositions During Extrusion via Pressure Signals and Machine Learning

Seunghoon Kang, Young-Gu Kim, Kyung Hyun Ahn

First published: 05 February 2026 | <https://doi.org/10.1002/pen.70407> | [VIEW METRICS](#)



Process optimization under small, noisy data.

Process and recycling QA.

Praktische Anwendungen/Impikationen



KI news in science and implications for SMEs

Process optimization under small, noisy data:

Hybrid Neural Ordinary Differential Equations for Data-Efficient Polymerization Modeling with Incomplete Kinetics, Almansreh et al. 2026

The article shows that hybrid AI models combining limited, noisy process data with existing mechanistic knowledge can enable robust and data-efficient process optimization, making them particularly relevant for SMEs with restricted experimental resources and imperfect production data.

Process and recycling QA:

Determining the percentage of recycled plastic content in a plastic product, Zaho et al. 2026

Real-Time Diagnosis of Polymer Compositions During Extrusion via Pressure Signals and Machine Learning, Kang et al. 2026

AI reduces manual work, improve consistency, increase purity, and create better decision support without waiting for a full autonomous polymer-design stack.



KI news in science: summary

Key message:

The strongest near-term value of AI in polymer/materials science is not “autonomous invention” alone, but faster, more robust decisions from small, heterogeneous, and noisy data.

01

Design & synthesis

LLM retrosynthesis predicts polymerization class, templates and candidate monomers from polymer SMILES.

02

Property prediction

Graph ML combines SMILES, MD/DFT and multi-fidelity data to predict many properties at once.

03

Process optimization

Hybrid NODEs and time-series ML use sparse or noisy sensor/process data for robust modeling.

04

Quality control

Multi-modal classifiers and pressure-signal models enable recycled-content and blend-composition checks.

