
“磁性材料·AI原子基座模型”发布

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38563.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

“磁性材料·AI原子基座模型”发布。在AI for Science (AI4S) 浪潮席卷全球、各国加速布局科学智能赛道的背景下，国内AI4S领域再添重要创新成果。

2月27日，中国工程物理研究院研究生院、清华大学、沐曦股份联合北京科学智能研究院等正式发布首个宽温压域的“磁性材料·AI原子基座模型”。经专家鉴定，该模型标志我国在磁性材料AI建模领域实现关键突破，将为新材料研发升级提供核心技术支撑。

在磁性材料领域，传统研发过程遵循“试错—实验—迭代”的范式，不仅周期长、成本高，而且由于难以精准捕捉组织与性能的关联关系，材料开发迭代还陷于“理论上可模拟、工艺上难实现”的困境。

据了解，此次发布的“磁性材料·AI原子基座模型”可在微纳米尺度精准模拟原子排布与磁矩转向，且首次覆盖了47种元素、0-1000K、0-10GPa的超宽温度和压强区间。模型可精准指导工艺、预测性能，大幅缩短磁性材料研发周期、降低研发成本，推动研发模式从“经验驱动”向“数据智能驱动”转型，有望赋能磁性材料及泛磁性材料万亿级市场的研发与产业升级。

国内包括中国工程物理研究院研究生院、清华大学、北京科学智能研究院等顶尖材料科研机构，已自主研发Deltaspin、DeepSpin、TSpin等计算方法，并深度融合ABACUS、DeePMD?Kit、DPA等计算工具与框架，形成完整的磁性材料智能计算体系。在构建70万组宽温压域原子—磁矩双耦合结构数据集和模型训练过程中累计消耗数千万卡时算力，主要由沐曦GPU完成算力供给，其高带宽、高稳定性的优势大幅提升算力交付效率，原本需要一个月才能完成的计算量，如今仅需一天即可高效达成，助力模型快速完成训练与优化，彰显了国产GPU在人工智能驱动科技创新中的支撑价值。

当前，我国正围绕AI4S大力建设下一个创新高地。2025年，国务院印发《关于深入实施“人工智能+”行动的意见》，明确将“人工智能+科学技术”列为首个加快实施的重点行动。

作为国产高性能全栈GPU的代表企业之一，沐曦股份将AI4S视作公司战略级赛道布局。今年1月，其推出新的产品序列曦索X系列GPU，精准瞄准AI4S领域，重点服务于材料预测、生命科学、气象海洋等前沿科学交叉研究方向，不仅提供全精度、高带宽、高稳定、长时可靠的高性能GPU算力支持，更搭载原生兼容主流生态的自研软件栈MXMACA。

作者：崔爽 来源：科技日报

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发