

项目支出绩效自评表 (2021年度)

| 项目名称 | | | 北京科学智能研究院建设 | | | | | | |
|----------|---|---------------|------------------------------|-------------------------------------|--|--|-----|---|---|
| 主管部门 | | | 北京市科学技术委员会 | | 实施单位 | 北京市科学技术委员会本级事业 | | | |
| 项目负责人 | | | 唐超 | | 联系电话 | 55577795 | | | |
| 项目资金（万元） | | | 年初预算数 | 全年预算数 | 全年执行数 | 分值 | 执行率 | 得分 | |
| | | | 年度资金总额 | 3,180.000000 | 3,180.000000 | 3,180.000000 | 10 | 100% | 10 |
| | | | 其中:当年财政拨款 | 3,180.000000 | 3,180.000000 | 3,180.000000 | - | 100% | - |
| | | | 上年结转资金 | | | | | | |
| | | | 其他资金 | | | | | | |
| 年度总体目标 | 预期目标 | | | | 实际完成情况 | | | | |
| | 搭建一支面向未来科学智能方向研发需求的高质量科研和工程团队，按照研发方向完成科研组织架构的搭建，补充科研支撑团队，并完善研究院决策机制；科研方向方面，以跨尺度建模为基本研究方法，在具有全球影响力的领域如密度泛函、分子动力学等领域不断实现新突破；生态建设方面，以开源为核心模式，以开源软件、开源数据、开源模型为抓手，推动开源社区建设，吸引学界和企业界的用户参与进来；社会影响方面，孵化和联合科学智能新范式驱动的创业企业，利用研究院垂直人才、模式的整合能力，推动新方法与商业需求相结合。 | | | | 科学智能研究院已经搭建了35人的科研工程团队，并有大量来自清华、北大、普林斯顿大学的在读硕博生参与 to 研究院的研发项目。形成了跨尺度基础科学研究、材料数据库与模型库建设、机器学习驱动的量子力学和密度泛函研究等5个科研小组。科研方向方面，已完成6篇高质量科研论文，并有1篇已经被nature子刊接受，分子动力学研究领域将模拟极限扩展至100亿原子规模，同时大幅度改进了国产密度泛函求解软件；生态建设方面，目前累计开源软件数量达14个，新增开源模型30余个，全球参与开源社区建设的人员超过5000人；社会影响方面，研究院整合深势科技面向企业的能力，与宁德时代、华为等企业共同凝练真实商业需求。 | | | | |
| 绩效指标 | 一级指标 | 二级指标 | 三级指标 | 年度指标值 | 实际完成值 | 分值 | 得分 | 偏差原因分析及改进措施 | |
| | 产出指标 | 数量指标 | 科学智能科研团队与工程团队人员数量 | 40人 | 35人 | 5 | 4.5 | 偏差原因：因2021年支持经费于12月23日到账，到账较晚，对招聘进度有所影响。 改进措施：加强团队建设，提高人员招聘效率。 | |
| | | | 开源软件建设 | 12个 | 14个 | 5 | 5 | | |
| | | | 材料数据库与模型库建设，新增单质和合金模型数量 | 25个 | 30个 | 5 | 5 | | |
| | | 质量指标 | 分子动力学模拟原子数量 | 50亿原子 | 100亿原子 | 5 | 5 | | |
| | | | 分子动力学软件版本升级 | 2.0版本 | 2.0版本 | 5 | 5 | | |
| | | | 国产密度泛函软件版本升级 | 2.3版本 | 2.2版本 | 5 | 4 | 偏差原因：在开发过程中进行了软件架构的重构，导致功能开发有滞后。 改进措施：尽快完成功能开发工作。 | |
| | | 时效指标 | 研究成果完成到论文投稿平均时间 | 2个月 | 3个月 | 10 | 6.7 | 偏差原因：实际招聘人数数低于预期，导致工作进度有所延缓。 改进措施：提高人员招聘效率，推进相关工作进度。 | |
| | | 成本指标 | 项目预算控制数 | 3180万元 | 3180万元 | 5 | 5 | | |
| | | | 计算资源使用单价每核时低于0.08元，每卡时低于4.0元 | 每核时<0.08元； 每卡时<4元 | 每核时0.06元； 每卡时3元 | 5 | 5 | | |
| | | 效益指标 | 社会效益指标 | 构建科研平台 | 为传统科研领域构建高质量的科研平台，为传统科研领域提供基础科研支撑 | 完成，科研平台已研发开源软件，建设材料数据库与模型库，持续升级分子动力学、国产密度泛函等软件 | 6 | 2.8 | 偏差原因：科研平台的使用，目前对用户的基本素质要求较高，友好性有待提升。 改进措施：提升用户友好性。 |
| | 生态效益指标 | | 开源社区人员数量 | 6000人 | 4000人 | 6 | 4 | 偏差原因：因疫情原因，开源社区活动受到影响。 改进措施：增加开源社区的线上活动。 | |
| | | | 真实参与到开源社区建设的企业数 | 6个 | 5个 | 6 | 5 | 偏差原因：1家企业未按约定，将代码贡献回开源仓库。 改进措施：加强对企业的管理与监控。 | |
| | | | 开源软件和方法新增引用数量 | 400个 | 500个 | 6 | 6 | | |
| | 可持续影响指标 | | 可持续迭代发展能力 | 通过开源社区和基础科研平台建设，将为传统科研领域提供可持续迭代发展能力 | 完成，DeepModeling开源社区具有一定影响力，社区目前已有来自全球20余个国家，4000余人参与到社区的建设中 | 6 | 2 | 偏差原因：由于没有统一的运营管理，未能建立详实完整的统计数据。 改进措施：加强社区运营和数据统计。 | |
| 满意度指标 | 服务对象满意度指标 | 研究院对市科委服务满意程度 | 不小于90% | 100% | 10 | 10 | | | |
| 总分 | | | | | | 100 | 85 | | |