

项目支出绩效自评表
(2022年度)

项目名称		北京科学智能研究院						
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		李顺超			联系电话		55577789	
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			
	<p>项目期目标：由鄂维南院士领衔的北京科学智能研究院团队依托在科学计算领域的全球领先优势，以科学计算、物理建模、机器学习和高性能计算为基本工具，以关键科学问题攻关、科学数据库建设、科学软件研发、科学研究平台建设和开源生态构建为主要工作目标，致力于为传统科研领域搭建一套融合科学智能方法的、世界领先的中国版科学软件平台，向传统科研领域输出科研支持服务，缩短或消除科学研究场景与实际问题场景间的距离，解决前沿科学研究成果与产业创新发展需要相脱节问题，为相关产业领域的科研和技术创新提供一套全新的科研基础设施体系（数据库与模型库、开源软件、工作流软件、开源社区）。年度目标：支持北京科学智能研究院以微观科学计算的基础开源软件及相关工作流管理软件开发为切入点，推动在全球学界、业界具有高影响力的科学计算开源社区的发展；继续聚焦科学智能材料数据库与模型库建设，补充与业界紧密相关的高质量能源材料、半导体材料等数据库与模型库建设；重点开启蛋白质折叠工作的理论突破与工具建设工作，以参加CASP15为重要驱动事件，陆续进行数据积累与沉淀，开启数据库建设工作。</p>				<p>2022年，科学智能研究院持续围绕微观科学计算基础理论开展研究，加快建设材料数据库与模型库，搭建新一代科学计算软件平台，建设面向全球的科学智能开源社区，在分子动力学模拟、国产密度泛函求解软件开发、科学智能领域生态和开源社区建设等方面已取得突破，具体成效如下：全球首次将第一性原理精度分子动力学模拟上限提升至100亿原子数量级，并发布覆盖近70种元素的原子间势函数预训练模型DPA-1；开源社区DeepModeling成员超过5000余人，覆盖20余个国家和地区，2022年内社区成果论文引用数量新增1500余次；以深度势能模型为基础系统性建设DP-Library数据库/模型库平台，用于存储量子力学计算元数据及在这些数据上训练出的深度势能模型，已完成以Li、Si、Ge、Sn、Pb、P、S为代表的能源材料数据库的建设。</p>			
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	推出1款打通经典分子动力学到粗粒化分子动力学的、有国际影响力的开源软件；继续改良改进以DeePMD-kit，DP-GEN等为代表的开源软件建设	1套	1套	5	5	
		数量指标	构建科学智能科研和工程团队	≥30人	46人	2	2	
		数量指标	完成以Li、Si、Ge、Sn、Pb、P、S为代表的能源材料数据库的建设，并同时对外发布2.0版本的数据库；基于重头折的方式完善数据库建设，实现2-50肽部分蛋白质数据库发布	1套	1套	5	2.5	偏差原因：依据2022年建设思路与建设目标，调整了2022年的科研任务，不再开展蛋白质数据库的建设工作 改进措施:加强科研目标和任务的可行性分析，及项目风险的不确定性分析
		数量指标	标准工作流软件	≥5套	8套	3	3	
		质量指标	标准工作流软件下载量	≥300次	500次	3	3	
		质量指标	社区用户量	≥3000个	5000个	3	3	
		质量指标	开源软件下载量	≥300次	2874次	3	2.1	偏差原因：2021年9月科学智能研究院成立，年底时设定2022年质量指标时，未系统化考虑2022年科研任务部署，指标值设定偏低，且开源社区发展趋势不易评估 改进措施：加强科研任务指标值的设定工作
		质量指标	模型数量	≥60个	62个	3	3	
		质量指标	开源社区建设与运营	1套	1套	3	3	
		时效指标	蛋白质和材料数据库和模型库发布、开源软件发布、工作流软件发布	≤12月	除蛋白质数据库外均完成	10	7	偏差原因：依据2022年建设思路与建设目标，调整了2022年的科研任务，不再开展蛋白质数据库的建设工作 改进措施:加强科研目标和任务的可行性分析，及项目风险的不确定性分析
		成本指标	项目预算控制数	≤3180万元	3180万元	10	10	

绩效指标	效益指标	经济效益指标	将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	高中低	开展基于机器学习的微观科学计算基础理论和方法研究，在机器学习驱动的电子结构理论、密度泛函方法、跨尺度建模等工作上取得突破。在机器学习求解薛定谔方程的研究中，设计保持体系反对称性且具有足够表示能力的机器学习模型用于求解多电子相互作用问题。在机器学习驱动的分⼦动力学研究中，科学智能研究院将第一性原理精度分子动力学模拟上限提升至100亿原子数量级，并发布覆盖近70种元素的原子间势函数预训练模型DPA-1，均为全球首次实现。在机器学习驱动的密度泛函理论研究中，针对新能源材料和药物分子材料领域设计了普适密度泛函	15	15	
		可持续影响指标	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	高中低	成功打造了全球第一个覆盖多尺度计算科学领域的开源社区DeepModeling并积极推动社区建设，目前社区成员超过5000余人，覆盖20余个国家和地区，2022年内社区成果论文引用数量新增1500余次，已覆盖化学反应、生物医药、合金材料、信息材料、能源材料、核能材料等应用领域	15	10	偏差原因：在科学智能领域，还需加强基础科研平台建设改进措施:持续加强开源社区DeepModeling及基础科研平台的建设工作
		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	≥ 90%	100	10	10
	总分						100	88.60