

# 概预算说明书

## （一）中央财政资金概预算说明

编制预算应坚持“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，结合课题实际据实编制。填报时，按照设备费、业务费、劳务费、奖励经费等四个类别填报。

### 一、设备费

设备费是指在攻坚专项实施过程中购置或试制的专用仪器设备，对现有仪器设备进行升级改造，以及租赁外单位仪器设备而发生的费用。计算类仪器设备和软件工具可在设备费科目列支。应当严格控制设备购置，鼓励开放共享、自主研发、租赁专用仪器设备以及对现有仪器设备进行升级改造，避免重复购置。

**预算说明：**（单台套价格50万元及以下的设备费，只需在表4中简单说明。单台套价格50万元以上的设备费，需逐项提供测算说明。）

**表 4 设备费一览表（中央财政资金）**

单位：万元

序号	设备名称	所属年度	金额
1	高性能计算工作站	第1年	10.0
2	高性能计算工作站	第3年	5.0
3	高性能计算工作站	第4年	5.0
合计			20.0

注：所属年度填写：第1年、第2年、第3年、第4年……

#### 1. 设备购置说明

说明包括但不限于：设备购置的必要性，购置设备的规格型号、功能和技术指标、单价、数量和金额等。单台套价格100万元及以上的购置设备还需提供三家以上产品报价单及其他详细说明，包括但不限于：与国内其他单位共享的可能性等情况，设备使用计划，设备选型和配置考虑等情况。

### (1) 高性能计算工作站：

设备购置的必要性：利用高性能计算工作站可以进行分子模拟软件的开发和测试，是进行“动力学智能计算及其标准建设推广”的重要支撑。

设备的规格型号和技术指标：联想（Lenovo）ThinkStation P8塔式图形工作站，CPU：AMD线程撕裂者7955WX 16核 主频4.5-5.3GHz，内存：128G，硬盘：1T固态+4T机械硬盘 GPU：Nvidia RTX 4090。

数量和金额：第1年拟购2台，参考单价：5.0万元，总金额：10.0万元。第3年和第4年分别采购1台，总金额均为5.0万元。

## 2. 设备研制说明

说明包括但不限于：设备研制的必要性，研制设备功能和技术指标、数量、设备研制需要主要零部件及安装调试费的说明等。单台套价格100万元及以上的研制设备还需提供其他详细说明，包括但不限于：研制的大型设备在国内外的分布和应用情况以及近年来的发展趋势，研制方法、技术路线、研制周期、参加人员以及研制成功的可能性，对完成整台设备研制所需要的全部成本进行分析说明，研制设备部件的生产厂家及研制设备加工厂家的情况等。

无。

## 3. 设备改造及租赁说明

说明包括但不限于：设备改造必要性，原有设备功能缺陷、设备改造主要内容、单价数量及金额；设备租赁必要性、租赁设备名称规格型号、时间、单价、金额等。

无。

## 二、业务费

业务费是指在攻坚专项实施中消耗的各种材料、辅助材料、低值易耗品及与科学实验直接相关的健康安全保护用品等的采购、运输、装卸、整理等费用，发生的测试化验加工、燃料动力、出版/文献/信息传播/知识产权事务等费用、差旅/会议/国际合作与交流，以及青苗补偿及临床试验费、与业务相关的设施和场地小型维修改造、土地及场地租赁等相关支出。

**表 5 业务费一览表（中央财政资金）**

单位：万元

序号	支出内容	所属年度	金额
1	管理费	第1年	8.0
2	会议费	第1年	5.0
3	差旅费	第1年	5.0
4	出版/文献/信息传播/知识产权事务费	第1年	2.0
5	测试化验加工费	第1年	12.0
6	管理费	第2年	6.0
7	会议费	第2年	5.0
8	差旅费	第2年	3.0
9	出版/文献/信息传播/知识产权事务费	第2年	1.0
10	测试化验加工费	第2年	7.0
11	管理费	第3年	7.0
12	会议费	第3年	5.0
13	差旅费	第3年	4.0
14	出版/文献/信息传播/知识产权事务费	第3年	1.0
15	测试化验加工费	第3年	12.0

16	管理费	第4年	5.0
17	会议费	第4年	5.0
18	差旅费	第4年	3.0
19	出版/文献/信息传播/知识产权事务费	第4年	1.0
20	测试化验加工费	第4年	7.0
21	管理费	第5年	5.0
22	会议费	第5年	5.0
23	差旅费	第5年	3.0
24	出版/文献/信息传播/知识产权事务费	第5年	2.0
25	测试化验加工费	第5年	6.0
26	管理费	第6年	5.0
27	会议费	第6年	10.0
28	差旅费	第6年	2.0
29	出版/文献/信息传播/知识产权事务费	第6年	4.0
合计			146.0

注：所属年度填写：第1年、第2年、第3年、第4年.....

预算说明：（根据需要，可按照业务费开支的具体事项补充相关测算说明）

### 1. 会议费

为进行动力学智能计算标准推广并建设相关软件生态，拟在第1-5年召开软件使用培训和技术交流的专项会议（寒/暑期学校），并在第6年召开更大规模的软件生态大会，会议费预算明细如下：

	会议名称	次数	标准 (元/人/天)	人数	天数	小计 (万元)
1	动力学智能计算软件开发实践和应用会议	5	500.0	50	2	25.0

2	动力学智能计算软件生态大会	1	1000.0	100	1	10.0
合计 (万元)						35.0

## 2. 差旅费

序号	出差事由	所属年度	出差人次数	人均差旅费 (元)	合计 (万元)
1	参加国内外学术会议和项目技术研讨会	第 1 年	10	5000.0	5.0
2	参加国内外学术会议和项目技术研讨会	第 2 年	6	5000.0	3.0
3	参加国内外学术会议和项目技术研讨会	第 3 年	8	5000.0	4.0
4	参加国内外学术会议和项目技术研讨会	第 4 年	6	5000.0	3.0
5	参加国内外学术会议和项目技术研讨会	第 5 年	6	5000.0	3.0
6	参加国内外学术会议和项目技术研讨会	第 6 年	4	5000.0	2.0
总计					20.0

## 3. 测试化验加工费

必要性说明:

随着计算机软硬件技术的提高,理论计算和模拟已经化学、物理、生物和材料科学领域里一个有效并应用广泛的工具,但是传统的理论计算方法在面对实际体系时还存在不小的问题,比如以分子动力学为代表的经验力场方法可以模拟较大体系,速度也比较快,但是模拟的精度要取决于经验力场的设定;而基于第一性原理的计算方法精度高但随之而来的就是高昂的计算代

价。人工智能驱动的新算法，为有效破解科学计算长期面临的精度和速度之间的矛盾提供了全新的解决方案。一套具有高性能、且易用性和可扩展性强的通用人工智能增强的分子模拟软件，不仅将增进机器化学家对于所关注体系分子机理的理解，也可以被用于进行高通量的分子数据生成，对用于机器化学家人工智能模型训练的数据进行补充和增强，从而进一步提高机器化学家的能力，推动科研进展。而进行相关人工智能模型的训练和动力学计算软件的大规模应用测试则需要大规模的算力支持。

此次拟购置的 GPU 和 CPU 算力旨在为开发相关人工智能算法、分子模拟软件提供基础算力支撑，计划通过租用云服务器机时来获得所需算力。具体采购明细如下：

序号	所属年度	算力单价	算力需求	合计 (万元)
1	第 1 年	3.00 元/卡·时	40000 卡·时	12.0
2	第 2 年	0.10 元/核·时	700000 核·时	7.0
3	第 3 年	3.00/卡·时	40000 卡·时	12.0
4	第 4 年	0.10/核·时	700000 核·时	7.0
5	第 5 年	3.00/卡·时	20000 卡·时	6.0
总计				44.0

### 三、劳务费

劳务费是指在攻坚专项实施过程中支付给参与攻坚专项任务的项目聘用人员、研究生、博士后、科研辅助人员、科研财务助理、客座人员、访问学者等的人力成本费用（含社会保险补助、住房公积金），以及支付给临时聘请的咨询专家的费用等。

项目聘用人员劳务费开支标准，参照当地科学研究和技术服务业从业人员平均工资水平，根据其在研究中承担的工作任务确定。支付给临时聘请的

咨询专家费用，不得支付给参与项目及所属课题研究和管理的有关人员，其管理按照国家有关规定执行。

**表 6 劳务费一览表（中央财政资金）**

单位：万元

序号	支出内容	所属年度	必要性	测算依据	金额
1	博士后劳务费	第1年	支付给从事项目研究的1名博士后的劳务费用	工作时间10个月，劳务费标准为0.8万/月	8.0
2	博士后劳务费	第2年	支付给从事项目研究的1名博士后的劳务费用	工作时间10个月，劳务费标准为0.8万/月	8.0
3	博士生劳务费	第3年	支付给从事项目研究的3名博士生的劳务费用	工作时间10个月，劳务费标准0.2万元/月/人	6.0
4	博士生劳务费	第4年	支付给从事项目研究的2名博士生的劳务费用	工作时间10个月，劳务费标准0.2万元/月/人	4.0
5	博士生劳务费	第5年	支付给从事项目研究的2名博士生的劳务费用	工作时间10个月，劳务费标准0.2万元/月/人	4.0
6	博士生劳务费	第6年	支付给从事项目研究的2名博士生的劳务费用	工作时间10个月，劳务费标准0.2万元/月/人	4.0
<b>合 计</b>					<b>34.0</b>

注：所属年度填写：第1年、第2年、第3年、第4年.....

预算说明：（根据需要，可进一步补充相关测算说明）

- 1.
- 2.

#### 四、奖励经费

奖励经费指在保障设备费、业务费和劳务费预算的前提下，攻坚专项资

金在扣除拨付给院外单位资金后，可提取不超过 20%的奖励经费，主要用于攻坚专项科研人员的绩效支出。奖励经费的使用范围和标准另行制定。

对承担攻坚任务的院外单位，可参照国家重点研发计划间接费比例提取管理费用，用于承担单位为项目研究提供的房屋占用、日常水电气暖等消耗、有关管理费用的补助支出以及激励科研人员的绩效支出等，纳入业务费预算并单独说明，不再安排奖励经费。

**预算说明：**（根据需要，可进一步补充相关测算说明，并明确经费所属年度）

1.

2.

## （二）其他渠道资金概预算说明

（按照预算科目和年度提供整体说明，并说明支出与子课题研究的关系）

无。

表 7 其他渠道资金概预算说明

单位：万元

序号	预算科目	所属年度	概预算整体说明	金额
1				
2				
...				
合 计				

# 专项任务书附后

中国科学院抢占科技制高点

# 攻坚专项任务书

## (子课题)

专项名称：数据驱动的先进智能科学家系统

总体单位：中国科学技术大学

技术总师：江俊

项目名称：集中式智能汇聚平台

承担单位：中国科学技术大学

负责人：江俊

课题名称：智能系统标准与生态建设课题

承担单位：中国科学技术大学

负责人：李鑫

子课题名称：动力学智能计算及其标准建设推广

承担单位（公章）：

负责人：杨立江

实施周期：2025 年 1 月至 2030 年 12 月

2024 年 12 月

中国科学院制

## 填写说明

一、《实施方案》是本任务书填报的重要依据，任务书填报不得降低考核指标，不得自行对主要研究内容作大的调整。《实施方案》和本任务书将共同作为子课题过程管理、综合绩效评价（验收）和监督评估的重要依据。

二、任务书通过“指挥调度与信息管理平台”，按照系统提示在线填写。

三、凡不填写内容的栏目，请用“无”表示。

四、涉密子课题请在“指挥调度与信息管理平台”下载任务书的电子版模板，按保密要求离线填写、报送。

五、图/表应按顺序编号，并在正文中引用。

### 子课题基本信息表

子课题名称		动力学智能计算及其标准建设推广							
公开名称		智能科学家系统标准化研究							
子课题编号									
承担单位	单位名称	北京大学			统一社会信用代码			12100000400002259P	
	通讯地址	北京市海淀区颐和园路5号	法定代表人	龚旗煌		邮编	100871		
起止时间		2025年1月 - 2030年12月				总计 72 月			
密级及保密时限		<input type="checkbox"/> 机密 年		<input type="checkbox"/> 秘密 年		<input type="checkbox"/> 内部			
子课题预算	子课题预算 <u>200.00</u> 万元，其中：中央财政资金 <u>200.00</u> 万元，其他渠道资金 <u>0.00</u> 万元（地方财政资金 <u>0.00</u> 万元，企业资金 <u>0.00</u> 万元，院属单位配套资金 <u>0.00</u> 万元，其他来源资金 <u>0.00</u> 万元）。 其他渠道资金中，以货币资金方式拨付到子课题相关单位的资金为 <u>0.00</u> 万元。								
中央财政资金预算	中央财政资金计划	2024年	2025年	2026年	2027年	2028年	2029年	2030年	合计
		0.00	50.00	30.00	40.00	30.00	25.00	25.00	200.00
其他渠道资金预算	其他渠道资金到位计划	2024年	2025年	2026年	2027年	2028年	2029年	2030年	合计
		0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00-	0.00
子课题负责人	姓名	杨立江		性别	<input checked="" type="checkbox"/> 男 <input type="checkbox"/> 女		出生日期	1975-06-23	
	证件类型	身份证			证件号码	650102197506231211			
	工作单位	北京大学化学与分子工程学院			最高学历	<input checked="" type="checkbox"/> 博士 <input type="checkbox"/> 硕士 <input type="checkbox"/> 学士 <input type="checkbox"/> 其它			
	专业技术岗位	<input type="checkbox"/> 正高 <input checked="" type="checkbox"/> 副高 <input type="checkbox"/> 中级 <input type="checkbox"/> 初级 <input type="checkbox"/> 其他				职务	理论与计算化学实验室主任		
	电子邮箱	yanglj@pku.edu.cn	移动电话	13718573524		涉密等级			
研究团队	子课题总计 <u>4</u> 人。其中： 高级专业技术职称 <u>3</u> 人，中级专业技术职称 <u>1</u> 人，初级专业技术职称 <u>0</u> 人，其他 <u>1</u> 人。 院内 <u>0</u> 人，其中全时人员 <u>0</u> 人；院外 <u>4</u> 人。（数据应与人员基本情况表相符） 博士学位 <u>4</u> 人，硕士学位 <u>0</u> 人，学士学位 <u>0</u> 人，其他 <u>0</u> 人。								

科研 管理 联系 人	姓名	夏义杰	性别	男	工作部门	北京大学化学与分子工程学院
	移动电话	15023735288			电子邮箱	yijiexia@pku.edu.cn
	证件类型	身份证			证件号码	500230199608061572
财务 管理 联系 人	姓名	王丽	性别	女	工作部门	北京大学化学与分子工程学院
	移动电话	18210341073			电子邮箱	1106582185@pku.edu.cn
	证件类型	身份证			证件号码	513002198207260064
档案 专员	姓名	王丽	性别	女	工作部门	北京大学化学与分子工程学院
	移动电话	18210341073			电子邮箱	1106582185@pku.edu.cn
	证件类型	身份证			证件号码	513002198207260064
子课题简介	<p>(限 1000 字以内)</p> <p>人工智能技术发展已历经 60 余年，并在近年来迎来了突破性的进展，不仅深刻影响着人类生活方式，也引起了科学研究范式的变革，人工智能驱动的科学（AI for Science）已成为了当前研究的热点。人工智能擅长在海量数据中寻找潜在的逻辑关系，从而为分析和理解实验数据提供强大的工具，大大拓展研究人员的探索空间。人工智能算法与传统动力学计算方法的结合，也能够大大提高动力学计算的效率和精度，帮助研究人员进行更大时空尺度的分子模拟和量子化学计算。本课题拟聚焦在科学研究中应用人工智能方法所面对的共性问题，重点进行科学数据库的建立和标准化、基础科学大模型设计与训练及智能化动力学计算软件开发探索。针对复杂分子体系相互作用类型繁多，涉及的动态演化跨越多个时间尺度的困难，在实验信息、物理与化学规律和底层算法的基础上，构建能够捕捉和预测复杂大分子动态结构变化的动力学计算方法，融合湿实验技术和人工智能模型，并进行交互和迭代。同时拟发展能进行高通量计算的跨尺度人工智能增强分子模拟技术，进行高精度的动力学计算。为了实现以上目标，本课题将发展基础理论和算法，并在统一框架下编写高效的深度融合人工智能的分子模拟软件，强化动力学智能计算对于智能科学家系统的支撑作用，拓展与其相关的软件生态的发展。</p>					

**填表说明：**（1）单位公章名称必须与单位名称一致；（2）资金的单位为万元，保留两位小数。

# 目 录

- 一、 子课题目标
- 二、 研究方案
- 三、 研究进度安排
- 四、 组织实施机制及保障措施
- 五、 人才队伍建设方案
- 六、 知识产权对策、成果管理及合作权益分配
- 七、 风险分析与控制
- 八、 参加人员基本情况表
- 九、 资金概算
- 十、 保密要求
- 十一、 有关单位签章

## 一、子课题目标

### （一）总体目标

文字表述瞄准的科技制高点，拟达到的总体目标、主要产出指标、有显示度的标志性成果等。

建立“实验+理论计算+AI”的新型研究范式，以 AI 技术为桥梁，将多模态实验数据和基于物理模型的分子层次的科学计算紧密联系起来，并形成交互和联动；**开发人工智能增强的分子模拟方法和软件**，实现高通量、跨尺度分子模拟，突破复杂生物、化学、材料体系研究中的时空尺度和计算精度的限制，强化动力学智能计算对于智能科学家系统的支撑作用。**面向国产高性能计算和智能计算芯片**，开发和优化动力学智能计算软件，并**积极建设和拓展相关的软件生态**。

### （二）阶段目标

文字表述 2025 年、2027 年、2030 年各阶段目标、主要产出指标、有显示度的标志性成果等，并填写下表。

1. 开发非欧几何空间动力学演化加速算法，2025 年在简单多粒子体系的计算中动力学演化步长达到较传统算法 20 倍。2027 年实现分子体系的非欧几何空间动力学演化加速，2030 年实现复杂分子体系非欧几何空间动力学模拟。

2. 开发适用于超大体系的全原子模拟解决方案。到 2025 年完成分布式 GPU 加速的方案设计与验证，2027 年在超算集群上实现

RNA-蛋白-溶剂的组合力场动力学模拟，到 2030 年引入通信优化，加强稳健性和可靠性，落地分子模拟专用集群解决方案，实现超千万原子体系的全原子高效模拟。

3. 完成分子模拟软件 SPONGE 在国产处理器上的适配与优化。2025 年在 $\geq 3$  款国产处理器（不限于 CPU、GPU 或 NPU 等类别的处理器）上实现 SPONGE 的基本功能，提供动力学智能计算基本能力，计算性能达到同类知名软件 AMBER、GROMACS、LAMMPS 的 80-100%。2027 年设计并优化 SPONGE 并行算法，针对国产处理器和互连网络特性开发区域分解并行算法，降低通讯开销，实现 SPONGE 并行计算效率提升，在并行计算中线性度 $\geq 80\%$ 。2030 年进一步丰富和完善 SPONGE 的功能，实现 SPONGE 的大规模并行， $\geq 64$  个处理器并行线性度 $\geq 70\%$ 。

4. 开发基于 AI 框架的全功能分子模拟软件 1 套。2025 年实现 AI 框架自动微分、自动并行等高级功能的利用，实现动力学计算软件的人工智能增强，2027 年实现基于张量计算的高通量模拟（单处理器同时可模拟体系 $\geq 16$ ），2030 年适配国产主流芯片并实现性能优化提升，达到国际先进水平。

5. 建设和拓展动力学智能计算软件生态和社区。2025 年实现分子模拟软件 SPONGE 在 $\geq 3$  个算力中心的部署，提供完整的软件在线手册和使用教程 $\geq 10$  个，举办关于软件使用和开发的线下/线上培训课程 $\geq 1$  次，参与培训人员 $\geq 50$  人次。2027 年实现 SPONGE 在 $\geq 10$  个算力中心的部署，培训学员 $\geq 500$  人次，建立关于

SPONGE 使用和开发的线上社区和讨论组，社区注册用户 $\geq 300$ 人，活跃用户 $\geq 50$ 人。2030 年实现累计部署算力中心 $\geq 20$ 个，累计培训学员 $\geq 2000$ 人次，社区注册用户 $\geq 600$ 人，累计软件下载量 $\geq 5000$ 次。

表 X 子课题阶段目标与考核指标表

阶段目标			考核指标				考核方式、方法	
阶段目标名称	类型	指标名称	立项时已有指标值/状态	2025年指标值/状态	2027年指标值/状态	完成时指标值/状态		
主要目标	1	SPONGE 在国产处理器上的适配与优化 软件	指标 1.1: 适配国产处理器的分子模拟软件	无	在 $\geq 3$ 款国产处理器（不限于 CPU、GPU 或 NPU 等类别的处理器）上实现 SPONGE 的基本功能，提供动力学智能计算基本能力，计算性能达到同类知名软件 AMBER、GROMACS、LAMMPS 的 80-100%	设计并优化 SPONGE 并行算法，针对国产处理器和互连网络特性开发区域分解并行算法，降低通讯开销，实现 SPONGE 并行计算效率提升，在并行计算中线性度 $\geq 80\%$	进一步丰富和完善 SPONGE 的功能，实现 SPONGE 的大规模并行， $\geq 64$ 个处理器上并行线性度 $\geq 70\%$	第三方测评。测试体系采用 SPONGE 标准测试模拟体系。

			指标 1.2: 论文	无	/	发表论文 1 篇	/	论文接收函
2	非欧几何空间动力学演化加速算法	算法	指标 2.1: 动力学演化加速算法	无	在简单多粒子体系的计算中动力学演化步长达较传统算法 20 倍	实现生物大分子的非欧几何空间动力学演化加速	实现复杂体系非欧几何空间动力学模拟	潜在用户测评。以 SPONGE 使用常规动力学演化算法、步长 2fs 为比较标准。
			指标 2.2: 论文	无	/	发表论文 1 篇	/	论文接收函

	3	超大体系的全原子模拟解决方案	软件	指标 3.1: 超大体系的全原子模拟解决方案	无	完成分布式GPU加速的方案设计与验证	在超算集群上实现RNA-蛋白-溶剂的组合力场动力学模拟	引入通信优化,加强稳健性和可靠性	潜在用户测评。 超大体系的标准: 达到千万级别原子数的周期性体系。
--	---	----------------	----	---------------------------	---	--------------------	-----------------------------	------------------	--------------------------------------

	4	基于AI框架的全功能分子模拟软件	软件	指标 4.1: 原生于AI框架的分子模拟软件	已有软件的基本框架	实现模拟软件的自动微分、自动并行等高级功能, 实现动力学计算软件的人工智能增强	实现基于张量计算的高通量模拟(单处理器同时可模拟体系 $\geq 16$ )	适配国产主流芯片并实现性能优化提升, 达到国际先进水平	第三方测评。以国外同类软件JAX-MD/TorchMD为比较对象。
--	---	------------------	----	---------------------------	-----------	---	--	-----------------------------	-----------------------------------

	5	建设和拓展动力学智能计算软件生态和社区	软件生态	指标 5.1 软件生态	已开展 4 次 SPONGE 暑期 学校	实现分子模拟软件 SPONGE 在 $\geq 3$ 个算力中心的部署, 提供完整的软件在线手册和使用教程 $\geq 10$ 个, 举办关于软件使用和开发的线下/线上培训课程 $\geq 1$ 次, 参与培训人员 $\geq 50$ 人次	实现 SPONGE 在 $\geq 10$ 个算力中心的部署, 培训学员 $\geq 500$ 人次, 建立关于 SPONGE 使用和开发的线上社区和讨论组, 社区注册用户 $\geq 300$ 人, 活跃用户 $\geq 50$ 人	实现累计部署算力中心 $\geq 20$ 个, 累计培训学员 $\geq 3000$ 人次, 社区注册用户 $\geq 600$ 人, 累计软件下载量 $\geq 5000$ 次	网站及相关机构 数据统计测算
其他 目标									
科技	序号	报告 类型		数量		提交时间		公开类别及时限	

报告 考核 指标	1	年度 进展 报告	1	2025年12月	公开
	2	年度 进展 报告	1	2026年12月	公开
	3	年度 进展 报告	1	2027年12月	公开
	4	年度 进展 报告	1	2028年12月	公开
	5	年度 进展 报告	1	2029年12月	公开
	6	年度 进展 报告	1	2030年12月	公开
	7	最终 科技 报告	1	2030年12月	公开

备注：

1. **“阶段目标”**，列出与子课题目标紧密相关的主要、核心标志性进展或代表性成果。  
类型：新理论、新原理、新产品、新技术、新方法、关键部件、数据集/库、软件、应用解决方案、实验装置/系统、临床指南/规范、工程工艺、标准、专利、其他。
2. **“考核指标”**，要求指标清晰具体可考核，包括：相应成果的数量指标、技术指标、质量指标、应用指标和产业化指标等，其中，数量指标可以为专利、产品等的数量；技术指标可以为关键技术、产品的性能参数等；质量指标可以为产品的耐震动、高低温、无故障运行时间等；应用指标可以为成果应用的对象、范围和效果等；产业化指标可以为成果产业化的数量、经济效益等。同时，对各项考核指标需填写立项时已有的指标值/状态以及完成时要到达的指标值/状态。同时，考核指标也应包括支撑和服务其他重大科研、经济、社会发展、生态环境、科学普及需求等方面的直接和间接效益。如对国家重大工程、社会民生发展等提供了关键技术支撑，成果转让并带动了环境改善、实现了销售收入等。若某项成果属于开创性的成果，立项时已有指标值/状态可填写“无”，若某项成果在立项时已有指标值/状态难以界定，则可填写“/”。
3. **“考核方式方法”**，应提出符合相关研究成果与指标的具体考核技术方法、测算、测试方法等。一般应通过规范的技术测评、试验验证、第三方测评、潜在用户测评等方式进行考核；需明确考核条件，如环境设置、边界条件及相关参数等，并明确考核结果判定的参考标准。对于样品、样机类实物成果的考核，需进行试验验证，形成相关试验记录、测试报告等技术资料；对于软件类成果的考核，需进行第三方测评，形成软件测评报告。
4. **“科技报告类型”**，包括子课题综合绩效评价（验收）前撰写的全面描述研究过程和技术内容的最终科技报告、年度或中期检查时撰写的描述本年度研究过程和进展的年度进展报告以及在实施过程中撰写的包含科研活动细节及基础数据的专题科技报告（如实验报告、试验报告、调研报告、技术考察报告、设计报告、测试报告等）。其中，每个子课题应根据管理要求，每年撰写一份年度进展报告；在综合绩效评价（验收）前应撰写一份最终科技报告；每个子课题可根据研究内容、期限和经费强度，撰写数量不等的专题科技报告。科技报告应按国家标准规定的格式撰写。
5. **“公开类别及时限”**，公开科技报告分为公开或延期公开，内容需要发表论文、申请专利或涉及技术诀窍的，可标注为“延期公开”。需要发表论文的，延期公开时限原则上在2年（含2年）以内；需要申请专利的，延期公开时限原则上在3年（含3年）以内；涉及技术诀窍的，延期公开时限原则上在5年（含5年）以内。涉密子课题科技报告按照有关规定管理。

### (三) 里程碑节点

表 X 子课题里程碑节点与考核指标表

节点	预计时间	标志性进展或代表性成果	进展或成果类型	考核指标	考核方式
里程碑节点 1	2025 年 12 月	SPONGE 在国产处理器上的适配 并优化成功	软件	在 $\geq 3$ 款国产 处理器（不限 于 CPU、GPU 或 NPU 等类 别的处理器） 上实现 SPONGE 的 基本功能，提 供动力学智 能计算基本 能力，计算性 能达到同类 知名软件 AMBER、 GROMACS、 LAMMPS 的 80-100%	第三方测评。采用 SPONGE 标准测 试模拟体系。

节点	预计时间	标志性进展或代表性成果	进展或成果类型	考核指标	考核方式
里程碑节点 2	2025 年 12 月	非欧几何空间动力学演化加速算法	新方法	在简单多粒子体系的计算中动力学演化步长达到较传统算法 20 倍	潜在用户测评。以 SPONGE 使用常规动力学演化算法、步长 2fs 为比较标准。
里程碑节点 3	2030 年 12 月	超大体系的全原子模拟解决方案	应用解决方案	在超算集群上实现超大分子体系动力学模拟	潜在用户测评。超大体系的标准：达到千万级别原子数的周期性体系。
里程碑节点 4	2027 年 12 月	原生于 AI 框架的分子模拟软件	软件	实现基于张量计算的高通量模拟（单处理器同时可模拟体系 $\geq 16$ ）	第三方测评。以国外同类软件 JAX-MD/TorchMD 为比较对象。
里程碑节点 5	2027 年 12 月	动力学智能计算软件生态	其他	实现 SPONGE 在 $\geq 10$ 个算力	网站及相关机构数据统计测算

节点	预计时间	标志性进展或代表性成果	进展或成果类型	考核指标	考核方式
				中心的部署， 培训学员 ≥ 500 人次，建 立 关 于 SPONGE 使 用 和 开 发 的 线 上 社 区 和 讨 论 组 ， 社 区 注 册 用 户 ≥ 300 人 ， 活 跃 用 户 ≥ 50 人	
里程碑节点 6	2030 年 12 月	通过验收评估，完成资料归档	其他	/	/

备注：

1. “**进展或成果类型**”，从后面的类型中选择一种填写，新理论；新原理；新产品；新技术；新方法；关键部件；数据集/库；软件；应用解决方案；实验装置/系统；临床指南/规范；工程工艺；标准；其他。
2. “**考核方式**”，一般应通过规范的技术测评、试验验证、第三方测评、潜在用户测评等方式进行考核；需明确考核条件，如环境设置、边界条件及相关参数等，并明确考核结果判定的参考标准。对于样品、样机类实物成果的考核，需进行试验验证，形成相关试验记录、测试报告等技术资料；对于软件类成果的考核，需进行第三方测评，形成软件测评报告。

## 二、 研究方案

### （一） 主要研究内容

阐明拟解决的关键科学问题、关键技术问题；并对拟开展的主要研究内容和达到的关键技术指标进行详细阐述。

理论计算和模拟是科学研究领域里一个有效并应用广泛的工具，但是传统的理论计算方法在面对实际体系时还存在不小的问题，比如以分子动力学为代表的经验力场方法可以模拟较大体系，速度也比较快，但是模拟的精度要取决于经验力场的设定；而基于第一性原理的计算方法精度高但随之而来的就是高昂的计算代价。随着新一代人工智能技术的加速突破，科学研究的范式正在发生变革，进入到数据与模型双驱动的全新时代。以 AlphaFold2 为标志的科学智能的颠覆性突破，在大语言模型等的进一步加持下显现出巨大潜力。但是如何充分利用人工智能新技术“解放”科学生产力，通过数据驱动和机理驱动科学建模，加速实现动力学计算技术突破还需要攻关。大模型展现出强大的理解能力、生成能力、复杂推理能力，如何高质量利用实验观测数据与模拟数据、结合物理世界的基本原理科学建模，并通过完善模型结构和学习机制，加速科学研究新发现，则是动力学智能计算的关键问题。

数据是人工智能模型研发的重要生产要素。科学与工程数据来源多样、权属结构复杂、类型、格式和标准不一、共享技术无法有效匹配安全需求；动力学智能计算的发展需结合人工智能大

模型与科学计算技术，它们分别依赖 GPU/CPU 等不同的硬件设备，面临任务规模大、算力架构复杂、计算框架多样、精度不一、通信时延高等挑战，难以提供支撑多工具、多技术高效协同的大规模算力。因此面向高通量、高质量、高可靠的科学和工程数据应用，构建高质量科学语料数据汇聚平台，针对多模态科学和工程学数据，研发归集、标注、加密、共享、建模分析的关键技术和工具软件，构建数据质量评估、数据安全评测的技术体系，实现体系化、标准化、开放安全的科学和工程数据共享，也是动力学智能计算发展的关键。

本课题拟聚焦在科学研究中应用人工智能方法所面对的共性问题，重点进行科学数据库的建立和标准化、基础科学大模型设计与训练及干湿闭环研究范式探索。针对复杂分子体系相互作用类型繁多，涉及的动态演化跨越多个时间尺度的困难，在实验信息、物理与化学规律和底层算法的基础上，构建能够捕捉和预测复杂大分子动态结构变化的动力学计算方法，融合湿实验技术和人工智能模型，并进行交互和迭代。也需要发展能进行高通量计算的跨尺度分子模拟技术，进行高精度的动力学计算。还需要通过构建人工智能模型提取文献和知识图谱信息，并映射到分子尺度的微观物理模型，使得基于宏观知识的大语言模型能够“看得到”微观世界，也让基于物理的微观分子模型能够“对齐”宏观的文献知识。为了实现以上目标，本课题将发展基础理论和算法，在此基础上编写高效的结合深度学习的分子模拟软件，并积极建

设软件的生态，拓展动力学智能计算的应用范围，强化动力学智能计算对于智能科学家系统的支撑作用。

本课题的研究团队前期针对国产科学计算软件缺乏的问题，开发了一款高性能的分子动力学模拟软件 SPONGE (Simulation Package toward Next Generation Molecular Modelling)，该软件实现了创新性的高精度静电相互作用计算模块、高效灵活的增强取样模拟和无缝融合深度学习技术的各种人工智能辅助的分子模拟方法，适用于化学、材料和生物体系的模拟。SPONGE 注重程序的模块化和开放性的同时，也注重软件的兼容性和在应用上的便捷，内置多种转换工具、分析工具和模拟流程图形化设置界面等，帮助用户进行模拟体系迁移、结果分析和可视化呈现。在计算性能方面，SPONGE 则在底层针对英伟达 GPU 进行了深度优化，具有媲美现有主流分子动力学模拟软件的计算速度。首先我们将基于现有开源分子模拟软件和自主软件 SPONGE 开发适用于超大体系的全原子模拟解决方案，充分利用因人工智能大模型需求而催生的大规模 GPU 算力，为多尺度计算和人工智能训练提供轨迹和数据的支撑。但是，由于西方为限制我国在人工智能领域的发展，对我国实施了越来越严格的高端芯片的禁运，所以本课题将更注重推进动力学智能计算软件的完全国产化替代，进行 SPONGE 软件在国产处理器（不限于 CPU、GPU 或 NPU 等类别的处理器）上的适配与优化，实现 SPONGE 的基本功能，提供动力学智能计算基本能力。在 2025 年实现 SPONGE 在国产处理器上计算性能

达到同类知名软件 AMBER、GROMACS、LAMMPS 的 80-100% 的基础上，通过在科学计算新算法层面和程序开发技术层面的创新和深入研究，实现超长模拟时间步长的非欧几何空间动力学演化加速算法和高并行度的 SPONGE 计算能力。我们也将致力于开发原生于 AI 框架的分子模拟软件，充分利用人工智能领域的先进技术增强分子模拟的能力，通过发展科学数据生成和增强技术、基于大语言模型的集宏观文献知识、多模态实验信息和动力学模拟数据的预训练模型，拓展分子模拟应用的边界。而本课题在软件开发和推广中，我们也将注重软件生态的建设和人才的培养，通过不断完善软件使用开发手册、使用案例、开展软件线下/线上培训、寒/暑期学校和软件开发 Hackathon、积极联系算力中心进行软件推广和部署等方式，打造软件品牌和知名度、拓展软件应用生态。

## （二）技术路线

针对主要研究内容和达到的关键技术指标，对拟采用的原理、机理、方法、算法、模型、手段、路线等进行详细阐述。

### 1. 开发适用于超大体系的全原子模拟解决方案

截止 2024 年，业界的分子模拟软件最大可模拟体系大约在千万级别（噬菌体单体全原子动力学模拟）。如果考虑周期性边界条件，可模拟尺度大约在百万的量级。并且传统的大体系模拟，多是基于 CPU 的多线程模拟方案（例如使用 NAMD 软件模拟酶催

化过程的动力学系统)。在当下大模型爆发式发展的时代背景下，超大规模的 GPU 集群已经是触手可及的算力。因此本课题将借助 GPU 集群带来的计算效率的增益，开发一套分布式 GPU 加速的专用大体系分子动力学模拟解决方案。

大体系全原子模拟（例如亿级的原子数量）是对模拟时长和体系尺度的一种均衡，通过损失一定的运算效率，换取超大体系全原子模拟的可行性。实现超大体系的全原子模拟并不是最终目标，而是通过对体系微观涨落的模拟，为多尺度计算（例如粗粒化模拟）提供轨迹和数据的支撑。首先本课题将发展非欧几何空间动力学演化算法，实现对复杂分子体系的多构象结构和动力学性质的加速算法。在非欧几何空间中演化动力学方程，可以根据空间曲率的大小较为方便地选取可变和较长的积分步长，从而节省计算时间。本课题也将借鉴 NAMD 的 Remote Force 数据结构，结合 CUDA 的流计算（CuStream），最小化通信传输。如下图 1 所示是一种冯诺依曼架构下的大体系分子动力学模拟软件架构：

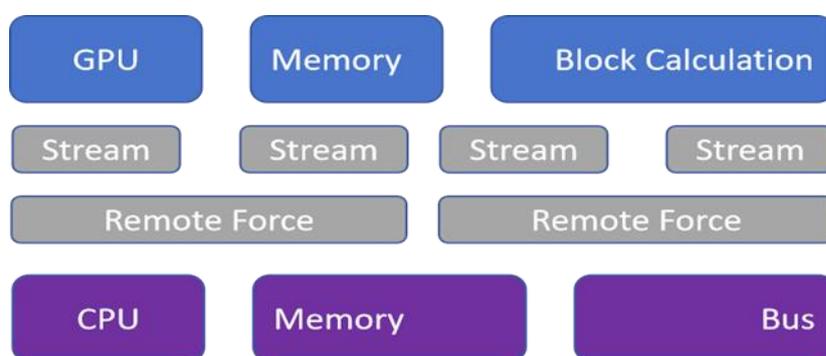


图 1 冯诺依曼架构下的分布式、GPU 加速分子动力学模拟软件架构

大体系的分子模拟所面临的主要问题与小体系模拟不同，集群化的大体系模拟因为涉及到大量的数据通信，其运算速度的瓶

颈不再是矩阵运算，而是通信传输（例如跨节点数据传输）和计算结果的可靠性（例如 GPU 的精度损失、节点通信的断点续传等）。本课题将借鉴通信领域已有的一些方案和技术（例如时分复用），实现一套分子模拟专用的分布式通信解决方案，同时推动分子模拟解决方案的行业标准化。

## 2. 分子模拟软件 SPONGE 在国产计算芯片上的适配和优化

随着全球科技竞争加剧，依赖传统计算架构可能面临供应链不稳定和制裁风险。因此在发展分布式 GPU 加速的专用大体系分子动力学模拟解决方案的同时，本课题将开展国产分子模拟软件 SPONGE 在国产处理器上的适配和优化工作。首先，我们将深入研究国产处理器的架构特点，包括其多核处理能力、内存子系统和指令集，从而针对性地调整 SPONGE 的底层代码，确保软件能在国产处理器架构上高效运行。我们也将针对分子动力学模拟的计算密集型特征，优化 SPONGE 的并行计算策略，包括负载均衡、通信效率和线程同步机制，以充分利用国产处理器架构的并行处理特性。同时，进一步设计高效的数据布局和缓存策略，减少内存访问延迟，优化数据传输流程，提升整体计算性能。我们也将建立一套全面的性能测试框架，量化评估软件适配和优化的成果，确保软件的高性能。最后，我们将选取科学研究中的典型场景，如蛋白质结构预测、药物分子先导物优化和电极材料模拟，验证 SPONGE 在实际应用中的效能。SPONGE 适配至国产处理器，不仅为国内科研提供自主可控的高性能分子模拟工具，保障计算资

源的安全性和稳定性，而且拓宽了在生物医药、材料科学等领域的应用前景。

### 3. 开发原生于 AI 框架的分子模拟软件

传统分子动力学模拟软件大多难以兼容当前的主流的 AI 框架，严重阻碍了人工智能算法在分子动力学模拟中的应用。本课题计划开发基于 AI 框架的智能化分子模拟软件，实现人工智能算法与分子模拟无缝结合。另外，传统分子模拟软件的原子受力计算需人工求解导函数并单独编写代码，这一方面大幅增加了工作量，另一方面也造成分子力场难以采用数学形式更复杂的势能函数。本课题计划开发“端到端可微”分子模拟软件将直接使用“自动微分”计算势能函数产生的力，从而方便分子力场采取更复杂的势能函数。为了达到以上目标，我们为人工智能增强分子模拟程序设计了独特的程序结构，该设计的核心思想在于将分子动力学模拟变为一种特殊的人工智能训练过程。如图 2 左侧所示，深度学习训练的过程是优化器 (optimizer) 以损失函数 (loss function) 为优化目标，通过提供的训练数据集 (training dataset) 计算神经网络参数的梯度，从而对参数进行更新。而分子动力学模拟过程其实跟深度学习训练过程具有相同的本质：积分器 (integrator) 以势能函数为参照，通过计算力—即势能函数对坐标的负梯度，实现对坐标的更新。因此，本课题设计了如图 2 右侧所示的全新分子动力学模拟程序结构，以势能函数作为损失函数，以积分器作为优化器，而坐标则即是待优化参数又是训练数据集，从而可

以实现像进行人工智能训练那样进行分子动力学模拟。AI 框架和硬件平台一般为深度学习训练设计，通常并没有专门为分子动力学模拟进行专门优化，而我们设计的这种“类 AI”的分子动力学模拟却可以最大程度发挥 AI 框架和硬件自身的能力。例如，由于 AI 框架支持张量运算，使得分子动力学模拟可以像 AI 训练时一次同时投喂多个批次（batch）的样本那样进行“高通量”的分子动力学模拟，从而可以在单张计算加速设备上同时执行多条轨迹的分子动力学模拟计算，这是目前所有传统分子动力学模拟软件都没有实现的功能。此外，原生于 AI 框架的分子动力学模拟软件具有“模块化”的程序框架，不仅大幅简化了程序开发，也允许科研人员根据需求使用相关的模块搭建属于自己的程序，从而实现适应科研需求的丰富功能。

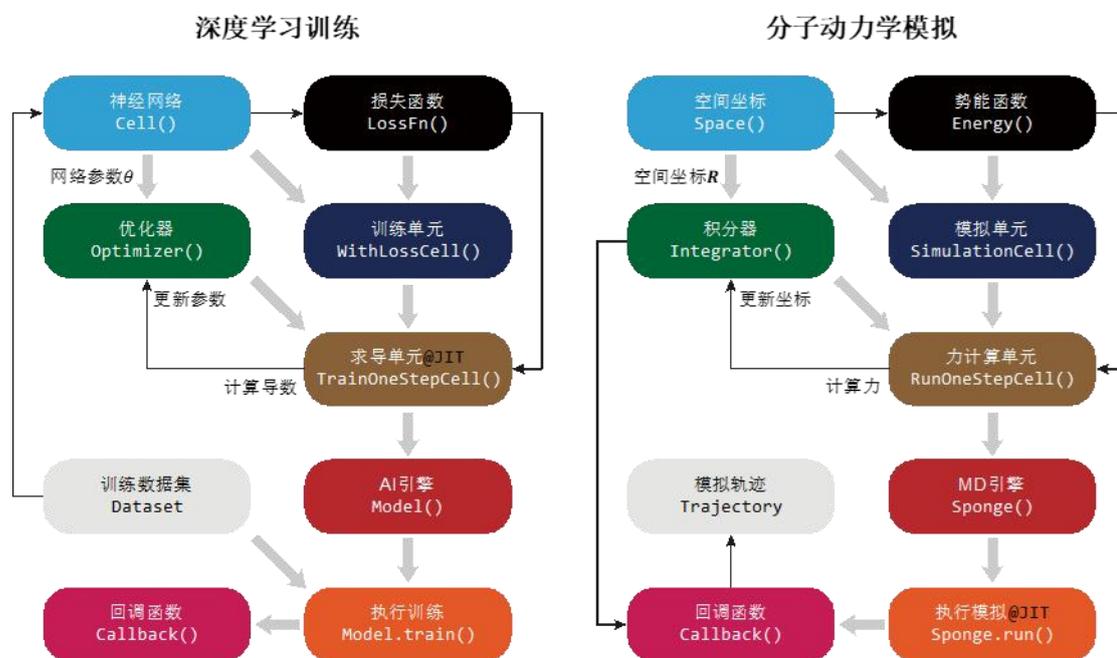


图 2 深度学习训练与分子动力学模拟的对比。左：基于 MindSpore 人工智能框架进行神经网络参数训练过程的示意图。右：基于新版

MindSPONGE 分子动力学模拟库进行分子动力学模拟过程的示意图。其中每个方块代表一种程序模块，灰色粗箭头为模块地组合过程，而黑色箭头表示数据更新流程。

#### 4. 科学数据挖掘和智能化分析技术开发

数据是人工智能的要素，也是智能科学家系统的基础。本课题将聚焦于发展通用的大数据挖掘和智能化分析流程，建立收集、整理和清洗公开文献和数据库以及加强数据标准化的通用方法和流程，为智能科学家系统提供数据支撑。另外，本课题也将在本项目发展的高通量自动化实验等关键技术的基础上，发展充分挖掘海量实验数据的方法，用来补充公开数据集。同时，本课题也将借助深度学习发展高精度力场，从而实现对于复杂体系的高通量多尺度模拟计算，而高通量计算获得的数据将进一步补充和丰富现有科学数据库。本课题也将通过发展科研大模型和应用，面向能源、生命科学、材料科学等领域研发场景，开展多学科数据关联分析和融合应用，推进跨学科、跨领域的交叉研究和协同创新，也在确保数据隐私和安全的前提下，进行科学数据有序开放共享，促进颠覆式技术创新。

#### 5. 数据驱动的动力学智能计算模型和软件构建

基于高质量的专业数据库，本课题也将开展动力学智能计算模型构建。首先，本课题将主要发展基于描述符或者图神经网络（GNN）的深度学习模型，通过训练学习分子、团簇、晶体等结构与不同物理性质之间的相关性，提取构效关系信息。其中，描

述符方法通过设计合理的特征描述符来表征材料结构，再利用深度神经网络、卷积神经网络（CNN）等模型学习描述符与性质的映射关系。而 GNN 方法通过将材料结构抽象为图的形式，利用图卷积、图注意力等操作学习材料结构中的局部和全局信息，自适应地提取关键结构特征。其次，本课题也将基于大语言模型（LLM）发展方法，建立宏观文献知识和微观物质结构的联系。大部分现有知识都无法以结构化信息的形式提供，只能以非结构化文本、表格或图像的形式存在于各种文献或知识图谱中，因此本课题将使用自然语言处理（NLP）技术将文本转换为结构化数据，将微观分子语言化，把多模态实验信息和动力学模拟数据接入大语言模型框架来搭建通用科学大模型，利用大语言模型的自然语言理解及逻辑知识的归纳泛化能力，实现碎片化知识的连接以更好的实现下游任务。使得大语言模型可以“看得见”微观世界，而微观分子模型也能对齐宏观文献知识。而且利用这样的大模型也将引发科学研究和人工智能领域人才的教育范式变革。基于大模型对知识的归纳能力，从大模型架构的角度来理解和学习领域内的专业知识，可以改变传统上获得专业知识的过程呈现碎片化的问题。而在这样的学习过程中，也使得学习者直接接触到最先进的人工智能技术，有利于培养出“AI 原生”的新型人才。最后，本课题将发展融合深度学习技术的高性能计算方法和软件，发挥深度学习处理大数据的能力及可外延的特性。例如，将密度泛函理论与机器学习结合，即用密度泛函理论的计算结果作为训练数据，

采用监督学习进行分子力学中的势函数训练；也将发展从全原子模拟或实验数据中构建粗粒化力场的强化学习方法，并通过构建神经网络势函数对涉及高能垒的稀有事件的采样进行加速。最后，动力学智能计算模型将融合进原生于 AI 框架的分子模拟软件生态，打造出具有高性能、且易用性和可扩展性强的人工智能增强分子模拟软件，为智能科学家系统提供软件支撑。

### 三、研究进度安排

按年度制定形成子课题的计划进度，应将子课题的考核指标分解落实到年度计划中。

#### 1. 2025 年度

##### (1) 上半年

重点任务：分子模拟软件 SPONGE 在国产计算芯片上的适配

预期进展或成果：在国产处理器上实现 SPONGE 的基本功能，提供基本分子模拟功能

##### (2) 下半年

重点任务：开发非欧几何空间动力学演化加速算法；SPONGE 软件生态建设

预期进展或成果：在简单多粒子体系动力学计算中实现大步长，

(3) 年度考核指标：在简单多粒子体系中实现计算中动力学演化步长达到较传统算法 20 倍；在  $\geq 3$  款国产处理器（不限于 CPU、GPU 或 NPU 等类别的处理器）上实现 SPONGE 的基本功能，提供动力学智能计算基本能力，计算性能达到同类知名软件 AMBER、GROMACS、LAMMPS 的 80-100%；实现原生于 AI 框架的分子模拟软件的自动微分、自动并行等高级功能；实现分子模拟软件 SPONGE 在  $\geq 3$  个算力中心的部署，提供完整的软件在线手册和使用教程  $\geq 10$  个，举办关于软件使用和开发的线下/线上培训课程  $\geq 1$  次，参与培训人员  $\geq 50$  人次。

#### 2. 2026 年度

### (1) 上半年

重点任务：开发适用于超大体系的全原子模拟解决方案；SPONGE 在国产处理器上的优化

预期进展或成果：完成分布式 GPU 加速的方案设计与验证

### (2) 下半年

重点任务：非欧几何空间动力学演化加速算法的完善，软件培训和线上社区、讨论组建设

预期进展或成果：在 SPONGE 中初步实现加速算法，完成相关论文的撰写，完成软件线上社区、讨论组初步建设

(3) 年度考核指标：非欧几何空间动力学演化加速算法的实现代码；分布式 GPU 加速方案设计文档和验证测试案例；线下/线上软件培训 $\geq 2$ 次，培训人员 $\geq 200$ 人次

## 3. 2027 年度

### (1) 上半年

重点任务：超大体系的全原子模拟解决方案；SPONGE 在国产处理器上的性能优化

预期进展或成果：在超算集群上实现超大体系的动力学模拟

### (2) 下半年

重点任务：SPONGE 在国产处理器上的性能优化；基于 AI 框架的分子模拟软件的高通量计算；软件生态建设

预期进展或成果：SPONGE 在国产处理器上性能优化达标；实现基于张量计算的高通量模拟；软件生态得到拓展

(3) 年度考核指标：实现 SPONGE 并行计算效率提升，在并行计算中线性度 $\geq 80\%$ ；实现基于张量计算的高通量模拟（单处理器同时可模拟体系 $\geq 16$ ）；发表 SPONGE 迁移适配和非欧几何空间动力学演化加速算法论文各 1 篇；实现 SPONGE 在 $\geq 10$  个算力中心的部署，培训学员 $\geq 500$  人次，建立关于 SPONGE 使用和开发的线上社区和讨论组，社区注册用户 $\geq 300$  人，活跃用户 $\geq 50$  人

#### 4. 2028 年度

##### (1) 上半年

重点任务：软件推广和生态拓展

预期进展或成果：软件在项目内和科研/工业界得到更多应用

##### (2) 下半年

重点任务：SPONGE 在国产处理器上的性能优化；超大体系的全原子模拟解决方案完善

预期进展或成果：实现超大体系动力学模拟，SPONGE 性能进一步提升

(3) 年度考核指标：实现超千万原子周期性体系动力学模拟；线下/线上软件培训 $\geq 2$  次，培训人员 $\geq 500$  人次

#### 5. 2029 年度

##### (1) 上半年

重点任务：SPONGE、原生于 AI 框架分子模拟软件和超大体系全原子模拟解决方案的应用测试

预期进展或成果：软件和模拟解决方案的应用案例

## (2) 下半年

重点任务： 软件生态建设

预期进展或成果： 通过软件线下/线上培训进一步拓展软件应用生态

(3) 年度考核指标： 软件和模拟解决方案应用案例文档 $\geq 10$  个；  
线下/线上软件培训 $\geq 2$  次， 培训人员 $\geq 500$  人次

## 6. 2030 年度

### (1) 上半年

重点任务： SPONGE、原生于 AI 框架分子模拟软件、超大体系全原子模拟解决方案的应用测试和文档撰写

预期进展或成果： 软件、模拟解决方案和大模型的应用案例和相关技术文档

### (2) 下半年

重点任务： 测试准备和考核验收评估，项目资料归档

预期进展或成果： 测试报告、科技报告和项目资料

(3) 年度考核指标： 结题验收报告和最终科技报告；实现 SPONGE 的大规模并行， $\geq 64$  个处理器上并行线性度 $\geq 70\%$ ；实现累计部署算力中心 $\geq 20$  个，累计培训学员 $\geq 2000$  人次，社区注册用户 $\geq 600$  人，累计软件下载量 $\geq 5000$  次

## 四、组织实施机制及保障措施

### （一）组织管理机制

按需建立子课题组织管理体系，并阐述其运行机制。

本子课题成立子课题管理委员会及子课题顾问专家组，由这两个机构的成员组织、管理、监督子课题的执行。子课题管理委员会由课题负责人、子课题牵头单位的科研管理人员、子课题负责人、子课题项目管理联系人、子课题财务管理联系人和档案专员组成。承担对子课题的领导和监督职能，子课题的具体实施由子课题负责人负责，子课题负责人接受子课题管理委员会的领导与监督，以及子课题顾问专家组的建议。子课题管理委员会成员保持日常的沟通和联系，形成有机的工作整体，共同确保子课题的顺利执行。

### （二）实施运行机制

#### 1. 建立科研进展例会制度

综合执行子课题简报制度、年度及中期会议制度、季度视频（电话）会议制度，加强本子课题和课题其他子课题之间的沟通、交流和讨论。执行子课题半年简报制度，报告子课题的研究进展以及已获得的研究成果。子课题内部根据需要，可以自行组织必要交流会，除此之外，还将借助学术会议、专业组织例会等机会增加子课题与专项其他子课题沟通和交流的频次。

子课题建立严格的工作汇报制度，每周/每两周召开讨论会（或视频会议），每半年对阶段性成果做简报，在子课题内部进行充分

有效的交流与沟通，并及时将研究进程对课题进行汇报。

## 2. 建立经费使用与管理机制

子课题研究开展过程中主要涉及到设备采购/维护、耗材、测试、电费、水费、人员聘用等方面的支出。子课题严格按照科技部和北京大学相关财务规定进行财务报销，每年初和年末对子课题的经费收支情况进行核算，并将结果汇报子课题管理委员会。

## 3. 建立档案管理、安全管理、保密管理等相关配套管理措施

子课题档案专员负责按季度收集和整理子课题开展研究过程中的重要数据、代码、论文、设计图等档案资料，并向子课题管理委员会汇报。为保证数据的安全，所有档案每季度由档案专员交给子课题负责人一份作为备份。对于有保密要求的数据和档案，须设置安全等级高的密码进行保护，并严格限制其私下复制和通过网络私下传输（复制和传输需向子课题管理委员会申请）。

## 4. 加强与国内外优势团队的交流与合作

开展积极、开放、有效的国内外人才交流、互访、协作等，建立全国各优势团队之间的交流合作机制。本着“以我为主、平等交流、实质合作”的学术合作与交流的战略方针，进一步开展全方位、多层次、多角度的国内外合作与交流工作，建立起国际交流网络。邀请相关领域活跃在一线的国际著名学者以合作研究、访问、讲学等多种形式进行访问，鼓励科研人员参加不同形式的国际交流，包括合作研究、主办或承办学术会议等。

## 五、人才队伍建设方案

### （一）团队组建方案

团队由完成了国产高性能分子模拟软件 SPONGE 开发的核心骨干组成，现阶段共有 3 名全时人员，2 名核心骨干。

全时人员（投入 10 个月/年）：

杨立江 副研究员，课题负责人，职责：课题的总体设计规划和项目管理

夏义杰 助理研究员，科研管理联系人，职责：分子模拟软件和人工智能模型设计、开发；协助课题负责人进行项目管理

王丽 科研助理，财务管理联系人/档案专员，职责：协助课题负责人制定和执行预算、收集和整理项目档案

骨干人员（投入 6 个月/年）：

高毅勤 教授，职责：动力学计算理论方法研究

肖云龙 副教授， 职责：量子化学计算方法开发和人工智能模型研究

### （二）人才引进、培养目标及计划

由于本课题涉及大量软件代码开发、迁移和优化，因此需要在课题推进过程中逐步引进既懂科学计算又善于编写、调试代码的研究人员。本课题计划在 2024-2026 年引进具有数学/物理/化学/计算机背景、具有博士/硕士学位的青年人才 2-3 位，作为承担本课题全时任务的博士后、研究助理或工程师。

另外，本课题也将注重青年学生的培养，依托北京大学化学与分子工程学院，围绕本课题发展的方法和软件组织学术讲座、寒/暑期学校和学位课程，持续加大力度鼓励和支持本科生和研究生拓宽学术视野、强化研究能力，参与到本课题的研究和软件开发中，真正实现“以优良的学术氛围感染学生，以有挑战性的科研训练学生。”

### （三）日常管理与考核评价

人员考核评价、薪酬激励、岗位晋升等子课题人员及其中的全时人员管理措施。

对于全时人员承担的科研项目数进行严格要求，以保证其在课题任务中投入的时间。由于课题研究依托于计算平台的建设和相关软件的开发，所以与其他科研项目不同，非常需要专注于工程问题的人才，以保证平台基本运行和算法软件的开发和优化。因此需要健全多元化的人才评价体系，优化评价导向和奖励机制，不以论文发表数和发文期刊的影响因子作为考核评价的主要参考指标，在课题组内形成积极健康的学术氛围；优化薪酬体系，建立稳定的薪酬调节机制，提高优秀人才待遇，使人才能够潜心自由探索、安心体面工作。



## 六、 知识产权对策、 成果管理及合作权益分配

根据《中华人民共和国民法典》、《中华人民共和国专利法》、《中华人民共和国著作权法》等相关法律法规，各方本着相互合作的精神，就项目实施过程中涉及的知识产权约定如下：

1.本课题实施前课题牵头单位与合作单位已有的知识产权归各自所有，本课题执行过程中新产生成果的知识产权和技术秘密，按照课题的任务（合同）书和双方另行签订的联合实施协议为准。

2.因课题研究的需要，各自向对方提供的未公开的、或在提供之前已告知不能向第三方提供的与本项目相关的技术资料、数据等所有信息，包括但不限于各自所有或合法拥有的任何计算机程序、代码、算法、公式、过程、观念、图表、照片、制图、设计、产品、样品、发明创造（包括发明、实用新型和外观设计，无论是否获得专利）、技术秘密、版权、商标、产品研发计划、预测、策略、规范、实际或潜在商业活动的信息、客户与供应商名单、财务事项、市场营销计划等技术、商务上的信息等。未经提供方同意，不得提供给第三方。

3.因本课题研究的需要，各自向对方提供的相关信息，不构成向对方授予任何关于专利、著作权、商标权等知识产权的许可行为。

## 七、风险分析与控制

本课题属于前沿技术研究，但所开发的算法和软件等以开源共享为主，因此项目的市场风险较小。由于本课题涉及先进人工智能软硬件技术的应用，因此存在先进软硬件被禁用而研究受阻的技术风险和政策风险。为了应对潜在的先进软硬件被禁的风险，项目组坚持走国产化道路，采取了国产化软硬件和进口软硬件同时发展的对策，并且将重点放在了利用国产 AI 软硬件进行项目开发和研究上，从而可以最大程度规避可能的技术风险和政策风险。

## 八、参加人员基本情况表

**表 X 子课题参研人员基本情况表**

填表说明：1.专业技术职称：A、正高级 B、副高级 C、中级 D、初级 E、其他； 2.投入本子课题的工作时间（人月）：是指在任务实施期间该人年均为本子课题工作的满月度工作量； 3.人员类别：如子课题负责人、骨干、一般人员等； 4.是否有工资性收入：Y、是 N、否； 5.工作单位：填写单位全称，其中高校要具体填写到所在院系。																
序号	姓名	性别	出生年月 (自动导出)	证件类型	证件号码	专业技术职称	专业领域	最高学位	投入本子课题的工作时间 (年均人月)	参与子课题起始时间	参与子课题结束时间	人员类别	职责/任务	是否有工资性收入	工作单位	参加人员签字
1	杨立江	男	1975/06	身份证	650102197506231211	B	理论化学	博士	10	2024/07	2030/12	子课题负责人	课题的总体设计规划和项目管理	Y	北京大学化学与分子工程学院	
2	夏义杰	男	1996/08	身份证	500230199608061572	D	理论化学	博士	10	2024/07	2030/12	骨干	分子模拟软件和人工智能模型设计、开发；协助课题负责人进行项目管理	Y	北京大学化学与分子工程学院	
3	高毅勤	男	1972/06	身份证	372832197206250059	A	理论化学	博士	6	2024/07	2030/12	骨干	动力学计算理论方法研究	Y	北京大学化学与分子工程学院	
4	肖云龙	男	1980/04	身份证	513021198004130197	B	理论化学	博士	6	2024/07	2030/12	骨干	量子化学计算方法开	Y	北京大学化学与分子工程学	

												发和人 工智能 模型研 究		院	
全时人员合计__2__人										非全时人员合计__2__人					
有工资性收入合计__4__人										无工资性收入合计__0__人					

## 九、资金概算

表 X 子课题资金概算总表

金额单位：万元

序号	科目名称	合计	中央财政资金	其他渠道资金			
1	资金总额	200.00	200.00	0.00			
2	1. 设备费	20.00	20.00	0.00			
3	(1) 设备购置费	20.00	20.00	0.00			
4	(2) 设备研制费	0.00	0.00	0.00			
5	(3) 设备改造及租赁费	0.00	0.00	0.00			
6	2. 业务费	146.00	146.00	0.00			
7	3. 劳务费	34.00	34.00	0.00			
8	4. 奖励经费	0.00	0.00	0.00			
资金使用 年度计划	2024年	2025年	2026年	2027年	2028年	2029年	2030年
年度资金 合计	0.00	50.00	30.00	40.00	30.00	25.00	25.00
中央财政 资金	0.00	50.00	30.00	40.00	30.00	25.00	25.00
其他渠道 资金	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

注：按照《中国科学院抢占科技制高点攻坚专项资金管理实施细则（试行）》，子课题承担单位不得再向外转拨资金。

表 X 其他渠道资金来源情况

金额单位：万元

序号	经费来源	数额
1	从地方财政申请到的资金	0.00
2	其中：拨付到院属单位的资金	0.00
3	相关合作企业提供的资金	0.00
4	其中：拨付到院属单位的资金	0.00
5	院属单位配套的自有资金	0.00
6	除上述渠道外其他来源资金	0.00
其他渠道资金总额（1+3+5+6）		0.00

子课题承担单位财务管理部门负责人签字：

子课题承担单位财务部门（公章）

课题承担单位财务部门（公章）

年 月 日

## 其他渠道资金承诺书

\_\_\_\_\_（单位全称），为  
\_\_\_\_\_专项\_\_\_\_\_（项目/  
课题/子课题/其他合作任务名称），提供\_\_\_\_\_万元的资金，  
资金来源为\_\_\_\_\_（1、地方财政资金 2、  
企业投入资金 3、单位自有资金 4、其他来源资金）。其中，  
\_\_\_\_\_万元资金将以货币资金方式，按拨付计划足额拨付到  
中国科学院院属单位\_\_\_\_\_（具体单位名称）。

资金到位计划为：

1. \_\_\_\_\_年\_\_\_\_\_月，拨付至\_\_\_\_\_（单位），  
主要用于：\_\_\_\_\_。

2. \_\_\_\_\_年\_\_\_\_\_月，拨付至\_\_\_\_\_（单位），  
主要用于：\_\_\_\_\_。

特此证明！

出资单位（公章）：

年 月 日

## 十、保密要求

(一) 子课题密级为\_\_\_\_，保密期限\_\_\_\_，知悉范围\_\_\_\_。

### (二) 子课题任务保密要点

1. 机密级保密要点包括：
2. 秘密级保密要点包括：
3. 工作秘密事项包括：

### (三) 保密条件

承担单位按照有关保密规定，健全保密责任体系，加强定密管理，确定和控制知悉范围，强化保密教育和培训，在涉密人员、涉密文件资料、涉密信息设备和存储介质、涉密科研场所、涉密外协配套、外场试验、涉密会议、对外科技交流与合作、宣传报道、涉密信息网络、科技成果等方面进行明确规定并监督执行。

### (四) 保密责任

承担单位认真贯彻执行党和国家保密工作方针、政策，严格遵守国家和中国科学院有关法律法规和保密规定，落实各项保密要求，认真履行保密义务并承担相关责任，自觉接受保密检查和监督。

承担单位不再承担子课题任务后，继续履行保密义务，不泄露本子课题相关涉密信息。

## 十一、有关单位签章

### 子课题承担单位及子课题负责人承诺：

严格执行国家及中国科学院抢占科技制高点攻坚专项管理办法及相关细则的各项管理规定，对本子课题所有成果产出（包括但不限于新产品、新技术、标准、论文、专利等）的真实性、与子课题的关联性等负责，将按要求落实科研作风学风和科研诚信主体责任；经费全部用于与本子课题研究工作相关的支出，不截留、挪用、侵占，不用于与科学研究无关的支出；接受并积极配合相关部门的监督检查。如有违反，本单位和子课题负责人以及相关成果产出者愿接受相关部门做出的各项处理决定，包括但不限于终止子课题执行、追回子课题经费，取消一定期限院各类科技计划项目申报资格，记入科研诚信严重失信行为数据库以及主要负责人接受相应党纪政纪处理等。

子课题承担单位负责人（签字）：

子课题承担单位（公章）

子课题负责人（签字）：

年 月 日

### 课题承担单位意见：

课题承担单位负责人（签字）：

课题承担单位（公章）

课题负责人（签字）：

年 月 日

