

计算平台预约使用管理规定（试行）

计算平台包括：量子化学计算和计算机辅助药物设计两个平台，相关的软硬件属于大型贵重仪器设备，面向全校开放使用，为保障相关仪器的顺利运行，避免使用过程中出现对仪器的损坏，保证仪器高效公平地为全校师生的教学科研提供服务，特制定本管理办法，并将严格按照本办法管理计算平台相关软硬件的开放使用。

计算平台的硬件：本平台包括三台 DELL 超性能计算服务器、五台五舟超性能计算服务器。

计算平台的软件：本平台的软件包括：正版 Gaussian 16 量子化学计算软件、正版 Schrodinger Maestro 2019 计算机辅助药物设计软件，Amber16 分子动力学模拟软件，其他开源软件将根据使用需求陆续安装。

可提供的计算服务：

1、量子化学计算：分子的能量和结构、热化学性质、化学反应机理、原子电荷和偶极矩、分子轨道、核磁屏蔽和磁化性质、电离势和电子亲和势、静电势和电子密度、红外和拉曼光谱、振动圆二色光谱、振动转动耦合、吸收光谱、发射光谱（荧光和磷光）、周期性体系能量和结构。

2、药物分子设计：基于受体结构筛选、ADMET 性质预测、诱导契合对接、全新药物设计、蛋白同源模建、药效团、定量构效关系研究、分子动力学和蒙特卡罗模拟。

上岗要求：

1、本平台所有仪器在使用前，将对所有操作人员进行制度、软件使用培训。初级入门培训每年一次（研究生入学后开始），中高级培训每年一次（每年上半年），培训内容、时间将根据课题需求制定并进行调整。由于计算化学的复杂性，为达到最好的培训效果，希望相关人员及时跟进并巩固学习效果。

2、本仪器室仅对授权使用者开放，不允许其他无关人员进入实验室，一经发现，**罚款 500 元**，如果由此引发仪器故障将追究使用者责任。进入实验室后，请务必关好门。使用结束后确保门已锁好后再离开，若发现有人忘记关门，警告一次。请大家互相监督，杜绝安全隐患。

3、本仪器实行 24 小时开放制度。每一课题组可选定 1-2 个使用者，经过仪器管理员的培训、考核合格后方可独立使用，并使用专属的用户名和密码（密码由使用者自己设定），持有者应妥善保管账户和密码，离校前须通知管理员及时取消账户。其余未经培训人员一律不准上机操作，一经发现，**罚款 1000 元**，对造成仪器故障者，**其所属课题组将取消上机操作资格 3 个月**，并负责承担仪器维修费用。

4、仪器实行网上开放预约，预约网站为 <http://faces.ccrcc.uga.edu>，每个用户将由管理员负责制定用户名，密码在收到邮件后可进行修改。预约时段为每天**9:00-21:00**，可提前一周进行预约。测试人严格按照**预约时段进行仪器使用**，变更或取消预约时段请及时告知，如发现未按预约时段测试而影响测试秩序或违规记录者，给予**警告一次**。

5、路由器、交换机和服务器以及通信设备是网络的关键设备，必须放置计算机机房内，任何人不得自行配置或更换，更不能挪作它用。如一旦发现使用与本计算平台无关的任务，**将取消相关人员的使用资格，相关课题组也将通报批评**。

6、计算机房要保持清洁、卫生，并由专人 7*24 负责管理和维护（包括温度、湿度、电力系统、网络设备等），无关人员未经管理员批准严禁进入机房。

7、严禁易燃易爆和强磁物品及其它与机房工作无关的物品进入机房。

8、仪器管理员负责制定该仪器相关的各种管理制度，包括仪器室管理制度和测试预约制度，严格培训上机操作人员，防止因操作不当造成仪器故障。

9、机房装有摄像头 24 小时监控，用户使用期间仪器出现故障，应及时通知仪器管理员，以便尽快维修，隐瞒不报者将被取消测试资格，并酌情追究相关责任。

10、使用者请勿关闭仪器操作应用软件，以免影响其他人使用。

11、仪器使用者必须严格遵守本平台制定的相关规章制度和安全制度，严格按操作规程使用仪器。如因违反上述规定而造成的仪器损坏、影响性能者，本人将被取消仪器使用资格，其所属课题组将被取消上机操作资格 3 个月。

计算机病毒防范制度：

1、原则上不允许在电脑前处理数据，以免影响他人使用。计算数据通过远程访问拷贝至用户硬盘，严禁使用 U 盘拷贝数据，一经发现，警告一次。如果数据较大，请与管理员协商数据的拷贝及备份。

2、用户应有较强的病毒防范意识，如使用过程中发现病毒，应第一时间通知管理员进行处理。

3、未经管理员许可，用户不得在服务器上安装新软件，若确为需要安装，安装前应进行病毒例行检测。

4、用户如需经远程通信传送程序及数据，必须经过检测无病毒后方可进行数据传输并使用。

5、管理员应安装国家许可的正版防病毒软件并及时更新软件版本，定期对服务器进行杀毒扫描。

数据保密及数据备份制度：

1、管理员根据数据的保密规定和用途，确定用户的存取权限、存取方式。如相关功能发生变更，必须提供相关课题组长签字的审批手续，方可进行变更。

2、用户仅限使用本课题相关账号，密码设置应符合网络安全需要，账号及密码应妥善保管，密码如忘记请联系管理员进行密码重置。**严禁盗用他人账号使用服务器，并进行相关的数据计算。**

3、用户禁止泄露、外借和转移专业数据信息，一旦发现将吊销用户上机操作资格。

4、管理员定期对数据进行备份并异地存放，确保系统一旦发生故障能够快速恢复。业务数据必须定期、完整、真实、准确地转存到不可更改的介质上，并妥善保管，保存期限不少于一年。

其他注意事项：

1、每个课题组请注意账户和密码的保密工作，禁止将账户借给他人使用，由此造成产生的任何费用及后果由账户所有人课题组负责。

2、本管理办法中未提及的其他因使用者人为失误而造成的计算程序报错或停止，管理员有权根据情节轻重记过或停用账户。

3、本管理办法的解释权及未尽事宜的协调权属于药学院仪器平台管理组；
上述规定经公示无异议后即日执行。

我已仔细阅读上述条款并承诺遵照执行。

测试者签名：

导师签名：