

gosh: chasing the ghost in the shell

Wenping Guo

Table of Contents

[1. 基本功能](#)

[2. 下载与安装](#)

[3. 使用说明](#)

[3.1. 支持的格式](#)

[3.2. 读入文件](#)

[3.3. 输入文件](#)

[3.4. 格式化模板](#)

[3.5. 退出 REPL](#)

[4. 计算标准](#)

[4.1. BalckBox Model \(bbm\) Interfaces](#)

1. 基本功能

常见程序输入文件格式的相互转换, 支持自定义输出格式模板. 支持读/写包含多个分子的文件(比如 mol2, pdb 等轨迹格式), 支持读写分子键连关系, 原子电荷, 子结构信息等.

2. 下载与安装

下载地址

- for centos 5/6: [bin/gosh](#)
- for centos 7: [bin/gosh](#)

安装

- 将 gosh 复制到服务器~/bin 下即可.

3. 使用说明

调用 gosh 命令, 即进入 gosh 命令行子界面(REPL)

3.1 支持的格式

siesta/gulp/xtl/car 等格式暂时只支持写入. 其它格式可读可写):

```
gosh> avail
```

Listing 1:

```
filetype: "text/xyz", possible extensions: [".xyz"]
filetype: "text/mol2", possible extensions: [".mol2"]
filetype: "text/coord", possible extensions: [".coord"]
filetype: "text/mol", possible extensions: [".sd", ".sdf", ".mol"]
filetype: "vasp/poscar", possible extensions: ["POSCAR", "CONTCAR", ".poscar", ".vasp"]
filetype: "text/cif", possible extensions: [".cif"]
filetype: "text/pdb", possible extensions: [".pdb", ".ent"]
filetype: "gaussian/input", possible extensions: [".gjf", ".com", ".gau"]
filetype: "ms/car", possible extensions: [".car"]
filetype: "ms/xtl", possible extensions: [".xtl"]
filetype: "siesta/fdf", possible extensions: [".fdf"]
```

```
filetype: "gulp/input", possible extensions: [".gin", ".gulp"]
```

3.2 读入文件

gosh 会根据文件名(扩展名)自动确认文件格式:

```
gosh> load CONTCAR
```

3.3 输入文件

```
gosh> write foo.cif
```

以 gaussian input 格式输出

```
gosh> write foo.gjf
```

以 mol2 格式输出

```
gosh> write foo.mol2
```

3.4 格式化模板

gosh 支持自定义输出文件格式. 示例模板: [gulp.hbs](#)

模板语言参考:

1. [gchemol/README.md at master · ybyygu/gchemol](#)
2. [Handlebars.js: Minimal Templating on Steroids](#)

```
gosh> format gchemol/tests/files/templates/gulp.hbs
```

以上命令会根据模板, 将当前分子的信息格式化输出. 下面是示例:

```
# put keywords here
opti conp lbfgs
title
data_MOR
```

```
end
# put coordinates here
fractional
Si core 0.3007 0.0724 0.0412
Si core 0.3037 0.3088 0.0461
O core 0.1243 0.4170 0.4287
O core 0.1226 0.1954 0.4254
```

3.5 退出 *REPL*

```
quit
```

或

```
ctrl-d
```

4. 计算标准

4.1 *BalckBox Model (bbm) Interfaces*

用户的灵活性:

- 通过自定义输入文件模板, 处理任何计算任务
- 自定义输出文件的处理细节, 处理任何计算输出

gosh 负责:

- 将分子依据用户定义模板, 渲染为特定的计算输入卡.
- 调用用户定义的计算脚本, 收取计算结果.

PIPE

- 渲染化的计算输入卡 => stdin
- 计算脚本输出计算结果 => stdout

标准:

- 输入卡模板使用 `hbs` 格式
- 计算脚本的输出格式为 `ModelProperties`

参考:

- [Calculator interface proposal — ASE documentation](#)
- [Adding new calculators — ASE documentation](#)