

CENSO 3.0.5

ウェブページ

<https://github.com/grimme-lab/CENSO>
https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/CENSO_docs/censo.html

バージョン

3.0.5

インストール環境

- Python 3.14.2 (pyenv 2.6.17)
- anmr (enso 2.0.2)
- 他依存するパッケージ

インストール手順概略

```
$ module purge
$ module load pyenv/2.6.17
$ export PYENV_ROOT=/apl/pyenv/repos/2.6.17
$ pyenv virtualenv 3.14.2 3.14.2-censo-3.0.5
$ pyenv activate 3.14.2-censo-3.0.5
(3.14.2-censo-3.0.5) $ eval "$(pyenv init -)"
(3.14.2-censo-3.0.5) $ pip install censo pytest matplotlib pandas
```

メモ

- 共用領域に作った pyenv 環境内に導入しています。
- PATH 等の設定については cengo/3.0.5 の module に記述しています。/apl/censo/3.0.5/samples 以下にある例をご確認ください。
- anmr の実行ファイルは /apl/censo/3.0.5/bin に配置しています。
- ORCA 6.1.1, Turbomole 8.0 で動作確認済。
 - xtb 6.7.x は使えないようです。