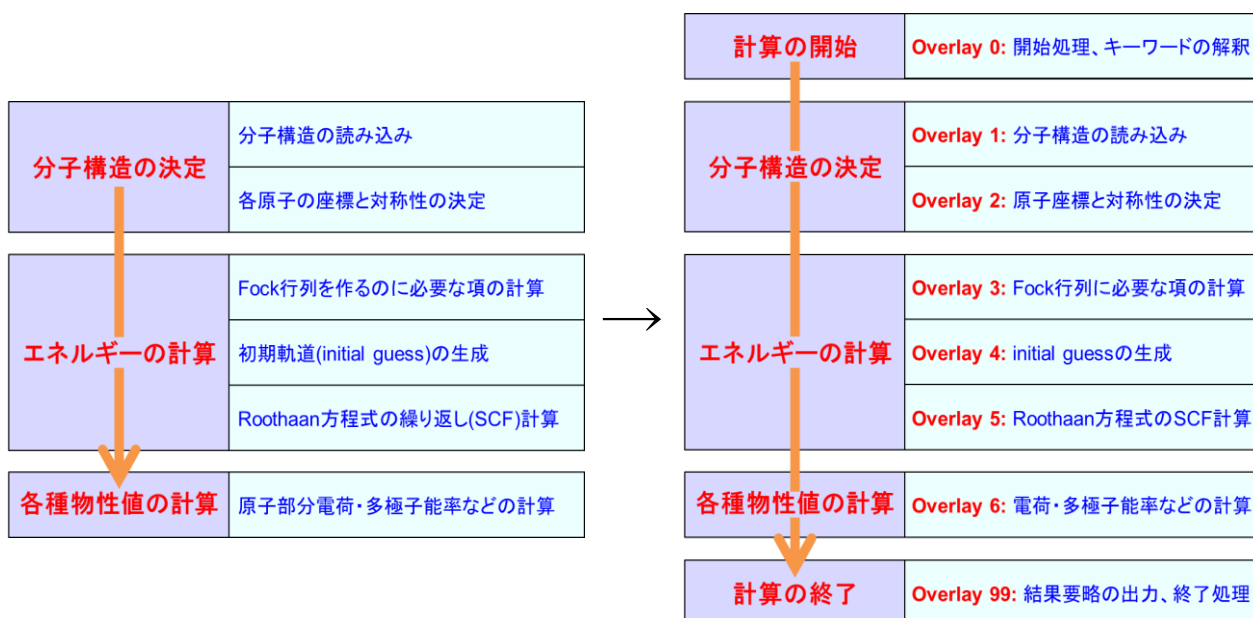


第5回配信： Gaussian計算の流れ

前回の配信では Gaussian でエラーが起こる理屈を理解するために、一般的な量子化学計算の流れについて解説しました。それを踏まえて今回は、実際の Gaussian プログラムではどのような流れに沿って計算が走るのかを見ていきましょう。

(5-1) Overlay の概念

単純のために、HF/DFT 一点計算の場合を考えましょう。前回の配信でお話した通り、この計算は下の左図のように6個のプロセスに分割され、それらのプロセスの連なりとして表されます。このようにプロセス単位で考えることは、計算が不首尾に終わった場合、どこに失敗の原因があったかが明確になるというメリットがあることを学びました。Gaussian では、これらの「プロセス」のことを「**Overlay**」と呼びます。この Overlay の概念を使って左図を書き直すと、右図のようになります。



各プロセスは Overlay 1～Overlay 6 という固有の名前で呼ばれ、それらの前後に Overlay 0、Overlay 99 という特別な Overlay が置かれます。Overlay 0 は計算の開始処理、Overlay 99 は計算の終了処理を司るプロセスであり、全ての Gaussian 計算は、必ず Overlay 0 から始まって、Overlay 99 で終わります。

上の HF/DFT 一点計算の例では (Overlay 99 を除くと) Overlay 6 までしか登場しませんが、Gaussian には全部で 13 個の Overlay が存在し、以下の表のように、Overlay ごとに大まかな役割を分担させています。

Overlay	大まかな役割	主な具体的処理	関連 Link(後述)
Overlay 0	計算の開始処理	- プログラムの初期化 - キーワードの解釈 - ジョブストリームの決定	L0, L1
Overlay 1	分子構造の制御	- 原子座標の読み込み - 原子座標の更新 - エネルギー数値微分のための制御 - ONIAM 計算の制御	L101, L102, L103, L105, L106, L107, L108, L109, L110, L111, L112, L113, L114, L115, L116, L117, L118, L120, L121, L122, L123, L124
Overlay 2	対称性の制御	- 原子座標の再配向とチェック - 対称性の制御	L202

Overlay 3	Fock 行列に必要な項の計算	・基底関数の設定 ・1電子 AO 積分の計算 ・2電子 AO 積分の計算	L301, L302, L303, L308, L310, L311, L314, L316, L319
Overlay 4	initial guess の生成	・initial guess の生成	L401, L402, L405
Overlay 5	SCF 収束手続き	・分子軌道の SCF 収束手続き ・SCF 分子軌道の決定	L502, L503, L506, L508, L510
Overlay 6	各種プロパティ計算	・SCF 分子軌道の解析 ・atomic charge、多極子モーメントの計算 ・NBO 解析	L601, L602, L604, L607, L608, L609, L610
Overlay 7	AO 積分の解析的微分	・1電子 AO 積分の解析的微分計算 ・2電子 AO 積分の解析的微分計算	L701, L702, L703, L716
Overlay 8	2電子積分変換	・電子相関計算および励起状態計算のための2電子 AO→MO 積分変換	L801, L802, L804, L811
Overlay 9	電子相関計算および励起状態計算	・TD-DFT ・CIS、CIS(D)、CID、CISD ・MP2、MP3、MP4、MP5 ・CCSD、CCSD(T) ・SAC/SAC-CI	L901, L902, L903, L904, L905, L906, L908, L913, L914, L915, L916, L918, L923
Overlay 10	軌道係数の解析的微分	・CPHF 方程式の構築と実行 ・CIS の解析的2次微分計算	L1002, L1003, L1014
Overlay 11	軌道係数の解析的微分に必要な項の計算	・高次微分に必要な積分の微分計算 ・2粒子密度行列の微分計算 ・MP2 の2次微分計算	L1101, L1102, L1110, L1111, L1112
Overlay 99	計算の終了処理	・計算結果のまとめの出力 ・プログラムの終了処理	L9999

計算中間結果は、Overlay 1 から Overlay 2、Overlay 2 から Overlay 3 へと次々に引き渡されていきます。中間結果がどの Overlay をどのように通っていくかを「ジョブストリーム」と言い、これは Overlay 0 内で決定されます。このジョブストリームは、アウトプットファイルからも確認することができます。例えば、DFT の一点計算の場合、アウトプットファイルの冒頭付近に以下のような出力を見ることができます。

```

-----
#P B3LYP/6-31G(d)
-----
1/38=1/1;
2/12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=1,6=6,7=1,11=2,16=1,25=1,30=1,74=-5/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
99/5=1,9=1/99;

```

今は、各行の一番左の数字だけに注目して下さい。すると、1→2→3→4→5→6→99 という数字の並びになっており、これはこの節の初めに説明した Overlay の流れの図に一致していることがわかります。

同様に TD-DFT の一点計算の場合を見てみると、

```

-----
#P B3LYP/6-31G TD=(Singlets,NState=3,Full)
-----
1/38=1/1;
2/12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=1,6=6,11=2,16=1,25=1,30=1,74=-5/1,2,8,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
8/6=1,10=90,108=3/1;
9/41=3,42=1,48=1/14;
6/7=2,8=2,9=2,10=2/1;
99/5=1,9=1/99;

```

Overlay の流れは 1→2→3→4→5→8→9→6→99 であり、基底状態 DFT 計算で通る Overlay に加えて、Overlay 8 と Overlay 9 を通っています。これらの Overlay の役割を先ほどの表から調べると、Overlay 8 は励起状態計算の前処理として必要な2電子積分変換、Overlay 9 は実際の励起状態の計算をそれぞれ担っていることがわかります。一方、このジョブストリームに採用されていない Overlay 7、10、11 は全て微分計算に関係する Overlay であり、エネルギーの微分を行わない一点計算の場合にはこれらの Overlay は関係ありません。したがって、このジョブストリームは励起状態の一点計算に必要な十分な Overlay 構成として理にかなっていることがわかります。

さて、さまざまなエラーに対処していくには、そのエラーが起こる理屈から理解する必要があると以前の配信でも述べてきましたが、これを Gaussian 計算の場合で言い換えれば、**どの Overlay でどのようなエラーが起こったのかを理解することが重要**であると筆者は考えています。もちろん、それを理解しただけでは解決できない、もっと深い知見が必要となる問題があることも事実です。しかし、エラーが起こった Overlay が把握できれば、それだけですぐに問題解決できる場合もありますし、さらに、その Overlay が計算全体の流れの中でどういう役割や処理を担っているかを大雑把にでも知っていれば、エラー原因の考察がぐっと楽になります。次回配信では、エラー時の Overlay の確認方法や、各 Overlay で起こり得る典型的なエラーについて解説する予定です。

(5-2) Link の概念

Gaussian 計算は Overlay というプロセスの連続により制御されており、その流れの中で各 Overlay は任せられた役割を果たすために具体的な処理を行うのですが、その処理内容は前節の表からもわかるように大抵1つではなく、幾つかの「小プロセス」に分割して考えた方が便利なが多いことです。これは、ハンバーグの調理の例で言えば、「食材の下ごしらえ」というプロセスが、実際には「材料を適切な大きさに切る」「切った玉ねぎを炒める」「パン粉に水を加えて絞る」などといった幾つかの「小プロセス」から構成されることに似ています。この、Overlay を構成する「小プロセス」のことを Gaussian では「**Link**」と呼びます。

計算中間結果は Overlay から Overlay へ引き渡されますが、各 Overlay 内では、その Overlay を構成する Link から Link へと引き渡されます。例えば、HF/DFT 一点計算の場合、その流れは以下ようになります。



すなわち、Link の流れとしては、0→1→101→202→301→302→303→401→502→601→9999 となります。また全ての Gaussian 計算は、必ず Link 0 から始まって、Link 9999 で終わります。

Overlay と同様に、その計算における Link の流れも、アウトプットファイルから確認することができます。再び、DFT の一点計算の場合を例に挙げましょう。

```
-----
#P B3LYP/6-31G(d)
-----
1/38=1/1;
2/12=2,17=6,18=5,40=1/2;
3/5=1,6=6,7=1,11=2,16=1,25=1,30=1,74=-5/1,2,3;
4//1;
5/5=2,38=5/2;
6/7=2,8=2,9=2,10=2,28=1/1;
99/5=1,9=1/99;
```

今度は(2つのスラッシュ間の内容[†]は無視して)左端と右端の数字に注目して下さい。すると、

```
1//1;
2//2;
3//1,2,3;
4//1;
5//2;
6//1;
99//99;
```

となり、これは実際の Link の流れ、(0→1→)101→202→301→302→303→401→502→601→9999 に一致していることが分かります。

各 Link とその役割を下表に示します。ただ、エラー対策という目的では Link の役割までしっかり勉強する必要はなく、大抵は前節の Overlay の役割が大まかに把握できていれば十分です。下表は、Overlay より細かい Link の役割にまで踏み込んでエラー原因を考察する必要がある場合に、辞書的にご利用下さい。

Overlay	Link	主な役割
Overlay 0	L0	プログラムの初期化、Overlay の制御
	L1	キーワードの解釈、実行 Link リストの構築、スラッシュファイルの初期化
Overlay 1	L101	タイトルと分子指定の読み込み
	L102	Fletcher-Powell 法による構造最適化
	L103	Berny 法による構造最適化(最安定構造、遷移状態構造、STQN 遷移状態構造)
	L105	Murtaugh-Sargent 法による構造最適化
	L106	分極率・超分極率を求めるための力・双極子の数値微分計算
	L107	線形同時通過(LST)法による遷移状態構造の探索
	L108	非緩和ポテンシャルエネルギー曲面の走査
	L109	Newton-Raphson 法による構造最適化
	L110	エネルギーの数値的 2 次微分による分子振動計算
	L111	エネルギーの数値的 2 次微分による分極率・超分極率の計算
	L112	self-consistent virial scaling(SCVS)法の実行
	L113	解析的微分を用いた固有値追従(EF)アルゴリズムによる構造最適化
	L114	EF アルゴリズムによる数値的構造最適化(エネルギーのみを使用)
	L115	GS3 アルゴリズムを用いた反応経路追跡
	L116	自己無撞着反応場(SCRF)の数値的計算
	L117	等電子密度面分極連続体モデル(IPCM)による溶媒和計算
	L118	Born-Oppenheimer 分子動力学(BOMD)計算
	L120	ONIOM 計算の制御
	L121	原子中心密度行列伝播(ADMP)分子動力学計算
	L122	Counterpoise(CP)補正計算
	L123	Hessian-based Predictor-Corrector(HPC)アルゴリズム等を用いた反応経路追跡
	L124	PCM 付き ONIOM および外部反復 PCM の計算
Overlay 2	L202	原子座標の再配向、対称性の制御、変数のチェック

Overlay 3	L301	基底関数情報の生成
	L302	重なり積分、運動エネルギー積分、核-電子引力ポテンシャル積分の計算
	L303	多極子積分の計算
	L308	双極子速度(∇)および角運動量($\mathbf{R} \times \nabla$)積分の計算
	L310	非短縮様式での spdf 2 電子積分の計算
	L311	sp 2 電子積分の計算
	L314	spdf 2 電子積分の計算
	L316	2 電子積分の出力
	L319	近似的スピン-軌道相互作用に関する 1 電子積分の計算
Overlay 4	L401	分子軌道の initial guess 生成
	L402	半経験的計算および分子力学(MM)計算
	L405	多配置(MC)-SCF 計算の初期化
Overlay 5	L502	SCF 方程式の反復的解法(従来法、all direct 法、SCRF 計算)
	L503	直接最小化を用いた SCF 方程式の反復的解法
	L506	ROHF または GVB-PP 計算
	L508	2 次収束 SCF プログラム
	L510	MC-SCF 計算
Overlay 6	L601	電荷密度および関連量の解析(多極子モーメントの計算を含む)
	L602	1 電子プロパティの計算(ポテンシャル、電場、電場勾配など)
	L604	グリッド点上の分子軌道および電子密度の評価
	L607	自然結合軌道(NBO)解析
	L608	非反復的 DFT エネルギーの計算
	L609	Atoms in Molecules (AIM) プログラム
	L610	数値的積分(積分プログラムのテスト用)
Overlay 7	L701	1 電子積分の 1 階および 2 階微分計算
	L702	2 電子積分の 1 階および 2 階微分計算(sp 関数)
	L703	2 電子積分の 1 階および 2 階微分計算(spdf 関数)
	L716	構造最適化および振動計算用の情報処理
Overlay 8	L801	2 電子積分変換の初期化
	L802	積分変換の実行(N^3 in-core アルゴリズム)
	L804	積分変換の実行
	L811	積分導関数変換およびそれらの MP2 の 2 次微分への寄与の計算
Overlay 9	L901	2 電子積分の反対称化
	L902	Hartree-Fock 波動関数安定性の決定
	L903	旧アルゴリズムの in-core MP2 計算
	L904	Petersson らの方法による完全基底系(CBS)外挿
	L905	複素数 MP2 計算
	L906	semi-direct アルゴリズム MP2 計算
	L908	電子伝播関数プログラム
	L913	post-SCF(電子相関)エネルギーとその微分計算
	L914	CI-Single 計算、乱雑位相近似(RPA)計算、ZIndo 励起状態、SCF 安定性
	L915	MP5、QCISD(TQ)、BD(TQ)における 5 次量の計算
	L916	旧アルゴリズムの MP4 および CCSD 計算
	L918	波動関数の再最適化
	L923	SAC/SAC-CI 計算
Overlay 10	L1002	CPHF 方程式の反復的解法(NMR 計算を含む)
	L1003	CP-MCSCF 方程式の反復的解法
	L1014	CI-Single の解析的 2 次微分計算
Overlay 11	L1101	1 電子積分導関数の計算
	L1102	双極子導関数積分の計算
	L1110	$F^{(s)}$ に対する 2 電子積分の微分項の寄与
	L1111	2 粒子密度行列と電子相関項の微分計算
	L1112	MP2 の 2 次微分計算
Overlay 99	L9999	計算結果のまとめの出力、プログラムとアウトプットの終了処理

(5-付録) HF および DFT 構造最適化計算の理論的背景

ここでは HF/DFT 計算の構造最適化計算の理論的背景をごく簡単に概説します。前回配信と同様、これにより第2部の配信内容の理解をより深めることができますが、あくまで付録ですので、興味のない方は読み飛ばしていただいて構いません。

前回配信の通り、分子の全エネルギーは以下のように与えられます。

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \sum_i n_i C_{\mu i} C_{\nu i} (h_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}) + \sum_{A>B} \frac{Z_A Z_B}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|} \quad (5.1)$$

ここで、ギリシャ文字、小文字アルファベット、大文字アルファベットの index はそれぞれ基底関数、分子軌道、(分子を構成する)原子のindexを意味し、 $C_{\mu i}$ は分子軌道係数、 n_i は*i*番目の分子軌道の占有電子数、 Z_A は原子Aの核電荷、 $\mathbf{R}_A$ は原子Aの座標ベクトルを表します。残りの $h_{\mu\nu}$, $F_{\mu\nu}$ は1電子ハミルトニアン行列、Fock 行列と呼ばれ、それぞれ

$$h_{\mu\nu} = \int \phi_{\mu}(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \phi_{\nu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (5.2)$$

$$F_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} + \sum_{\kappa\lambda} \sum_i n_i C_{\kappa i} C_{\lambda i} (I_{\mu\nu\kappa\lambda} - \theta I_{\mu\lambda\kappa\nu}) \quad (5.3)$$

で与えられます(各項の意味は前回配信の付録をご参照下さい)。以上の量は Roothaan 方程式を解けば全て求まり、Overlay 5 が終了した時点で既知情報となります。

さて、分子の構造最適化を行う場合、各原子(核)に働く力を計算し、その力のベクトルの方向に原子を動かしてやらねばなりません。そのためには、式(5.1)を各原子(核)座標で微分した表現を得る必要があります。まず、式(5.1)の形を少し簡略化して書き直しておきます。

$$E = \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} h_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j \sum_{\mu\nu\kappa\lambda} C_{\mu i} C_{\nu i} C_{\kappa j} C_{\lambda j} J_{\mu\nu\kappa\lambda} + V_{\text{nuc}} \quad (5.4)$$

ただし、

$$J_{\mu\nu\kappa\lambda} = I_{\mu\nu\kappa\lambda} - \theta I_{\mu\lambda\kappa\nu} \quad (5.5)$$

$$V_{\text{nuc}} = \sum_{A>B} \frac{Z_A Z_B}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|} \quad (5.6)$$

式(5.4)をある原子(核)座標 X について微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial X} = & \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} \frac{\partial h_{\mu\nu}}{\partial X} + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j \sum_{\mu\nu\kappa\lambda} C_{\mu i} C_{\nu i} C_{\kappa j} C_{\lambda j} \frac{\partial J_{\mu\nu\kappa\lambda}}{\partial X} \\ & + \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} \frac{\partial (C_{\mu i} C_{\nu i})}{\partial X} h_{\mu\nu} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j \sum_{\mu\nu\kappa\lambda} \frac{\partial (C_{\mu i} C_{\nu i} C_{\kappa j} C_{\lambda j})}{\partial X} J_{\mu\nu\kappa\lambda} + \frac{\partial V_{\text{nuc}}}{\partial X} \end{aligned} \quad (5.7)$$

となります。この式(5.7)の第1項、第2項、第5項の微分計算は比較的簡単にできるのですが、第3項、第4項は分子軌道係数の微分を含んでおり、まともに計算するのはかなり厄介です。というのも、分子軌道係数

の数式は Roothaan 方程式を介した陰な形でしか与えることができず、陽な数式の形で書き表すことができないからです。しかし、HF/DFT エネルギーの1次微分の場合に限り、この問題は回避することができます。式(5.7)をさらに変形すると、以下の式を得ます。

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial X} = & \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} \frac{\partial h_{\mu\nu}}{\partial X} + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j \sum_{\mu\nu\kappa\lambda} C_{\mu i} C_{\nu i} C_{\kappa j} C_{\lambda j} \frac{\partial J_{\mu\nu\kappa\lambda}}{\partial X} \\ & + \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} \left[h_{\mu\nu} + \sum_j n_j \sum_{\kappa\lambda} C_{\kappa j} C_{\lambda j} J_{\mu\nu\kappa\lambda} \right] \frac{\partial(C_{\mu i} C_{\nu i})}{\partial X} \\ & + \frac{\partial V_{\text{nuc}}}{\partial X} \end{aligned} \quad (5.8)$$

ところが、[] の中身を式(5.3)と見比べると、これは Fock 行列そのものであることがわかります。すると、

$$\begin{aligned} & \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} \left[h_{\mu\nu} + \sum_j n_j \sum_{\kappa\lambda} C_{\kappa j} C_{\lambda j} J_{\mu\nu\kappa\lambda} \right] \frac{\partial(C_{\mu i} C_{\nu i})}{\partial X} \\ & = \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \frac{\partial(C_{\mu i} C_{\nu i})}{\partial X} = \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} 2F_{\mu\nu} C_{\nu i} \frac{\partial C_{\mu i}}{\partial X} \end{aligned} \quad (5.9)$$

であり、さらにこれを Roothaan 方程式

$$\sum_{\nu} F_{\mu\nu} C_{\nu i} = \sum_{\nu} S_{\mu\nu} C_{\nu i} \epsilon_i \quad (5.10)$$

と比較すると、以下の表現を得ます。

$$\sum_i n_i \sum_{\mu\nu} 2F_{\mu\nu} C_{\nu i} \frac{\partial C_{\mu i}}{\partial X} = \sum_i n_i \epsilon_i \sum_{\mu\nu} 2S_{\mu\nu} C_{\nu i} \frac{\partial C_{\mu i}}{\partial X} \quad (5.11)$$

ここで、分子軌道の規格化条件より、

$$\int |\psi_i|^2 d\mathbf{r} = \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} \int \phi_{\mu} \phi_{\nu} d\mathbf{r} = \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} S_{\mu\nu} = 1 \quad (5.12)$$

であり、これを微分すると、

$$\frac{\partial}{\partial X} \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} S_{\mu\nu} = \sum_{\mu\nu} 2 \frac{\partial C_{\mu i}}{\partial X} C_{\nu i} S_{\mu\nu} + \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} \frac{\partial S_{\mu\nu}}{\partial X} = 0 \quad (5.13)$$

となり、式(5.11)と式(5.13)を見比べることにより、以下の関係式が得られます。

$$\sum_i n_i \epsilon_i \sum_{\mu\nu} 2S_{\mu\nu} C_{\nu i} \frac{\partial C_{\mu i}}{\partial X} = - \sum_i n_i \epsilon_i \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} \frac{\partial S_{\mu\nu}}{\partial X} \quad (5.14)$$

この式(5.14)は、厄介な軌道係数の微分が、わずかな計算量で済む重なり積分の微分にすり替えられると

いう点において、極めて重要な意味を持ちます。

以上をまとめると、HF/DFT エネルギーの微分表現は、最終的に以下の式で与えられます。

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial X} = & \sum_i n_i \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} \frac{\partial h_{\mu\nu}}{\partial X} + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j \sum_{\mu\nu\kappa\lambda} C_{\mu i} C_{\nu i} C_{\kappa j} C_{\lambda j} \frac{\partial J_{\mu\nu\kappa\lambda}}{\partial X} \\ & - \sum_i n_i \varepsilon_i \sum_{\mu\nu} C_{\mu i} C_{\nu i} \frac{\partial S_{\mu\nu}}{\partial X} + \frac{\partial V_{\text{nuc}}}{\partial X} \end{aligned} \quad (5.15)$$

式(5.15)において新たに計算しなければならないのは $\mathbf{h}$, $\mathbf{J}$, $\mathbf{S}$, V_{nuc} の微分量ですから、その計算を行えば、各原子(核)に働く力を求めることができます。Gaussian ではこの操作を Overlay 7で行っています。

力が求まったら、そのベクトルの方向へ実際に原子(核)を動かしますが、これは Gaussian では Overlay 1に戻って行います(Overlay 7では、力を求めるところまで)。Gaussian では力の大きさと、どれだけ原子を動かしたかを収束判定条件に採用しており、収束と見做されれば必要な出力の後に計算が終了し、未収束と見做されれば Overlay 1~7 の手順が再度繰り返されます。

一方、2次以上のエネルギー微分(分子振動、分極率、分子磁化率、核磁気共鳴などの計算に必要)や、電子相関理論(MP2、CCSD、SAC/SAC-CI など)のエネルギー微分の計算では、分子軌道係数の微分はもはや避けることができません。軌道係数の微分を行うには、**Coupled Perturbed Hartree-Fock(CPHF)方程式**という連立方程式を新たに解く必要があります。これについては、次回配信の付録にて解説する予定です。

† ジョブストリーム情報における2つのスラッシュ間の文字列は、「IOp 形式」と呼ばれる形式で指定された計算条件を表します。

IOp 形式は、Gaussian キーワードに用意されていないような細かい計算条件の指定をする時に、主に用いられます。

IOp 形式に関する詳細は、[Gaussian 社公式ユーザマニュアル](#)および [Gaussian 社公式 IOp マニュアル](#)をご参照下さい。

今回の内容は以上です。次回(第6回配信)では、「エラーと Overlay の関係性」を解説致します。

☆本メールニュースの内容は、過去配信分も含め、弊社ホームページ上に掲載されております。配信内容のご感想やご希望に関する簡単なアンケートも行っておりますので、よろしければご意見をお寄せ下さい。

http://www.hpc.co.jp/gaussian_nyumon.html