総 説

コンピュータを用いた有機化合物の
構造推定システム

佐々木 慎一・阿部 英次

豊橋技術科学大学・分析計測センター
(豊橋市天伯町字雲雀ヶ丘 1-1)

Computer-Aided Structure Elucidation Methods

Shin-ichi SASAKI and Hidetsugu ABE

Toyohashi University of Technology
(1-1, Hibarigaoka, Tenpaku-cho, Toyohashi)

はじめに

化学の研究、開発の諸分野においてコンピュータが果たしている役割は年々広くまた大きくなって来ている。その役割を大まかに分類すると次の三種に集約できよう。

- i 計算, 集計
- ii 制御, 計測
- iii 解析, 予測, 計画

このうち i と ii は計算機械としてのコンピュータの応用であり、化学の諸分野における利用の歴史も古くその例は枚挙にいとまがない。そこで本稿ではコンピュータの情報処理機械としての機能を使った iii の応用例について紹介して行きたい。これは専門家の経験, 知識, 技術を整理しコンピュータプログラム化することで、より多くの人々が専門家と同様の経験, 知識, 技術を共有できる道をひらこうとするものである。この応用例もまた多様であるが、ここではその一つの主題「有機化合物の構造推定」のためのコンピュータプログラムシステムについて述べて行きたい。

有機化合物を研究対象としている人々にとって構造推定は必ずの技術である。有機化学者の分子量の小さな簡単なものから、正しい構造を導き出すのに幾年もかかるような複雑な天然物に至る多様な構造推定の問題に絶えず直面している。現在ではそのための手段として各種の分析機械が広く用いられるようになっており、また一方で機器の自動化が進み容易に高品質のデータが取得できるようになった。今や構造推定の問題の大部分は機器分析データの解釈の問題に置き換えられたとあって、過言ではないだろう。

これから紹介して行くコンピュータプログラムシ

テムはこのデータを「解釈」し有用な情報すなわち構造を推定することを目的としたものである。情報科学の一部の研究者たちはこれを「知識工学」というカテゴリに入れてい

る。この知識工学の中心課題は専門知識の表現法、問題に関連する知識を選択して適用する方法、及び知識獲得法である。最初に紹介する Heuristic DENDRAL はこの知識工学の研究者と化学者の共同研究で産み出されたものである。したがって彼らの興味の中心はあくまでも化学者の持つ知識をいかにして定式化するかというところにあった。その次に述べる著者らの開発した CHEMICS はこれとは対照的に化学者だけで作り上げたプログラムシステムであり、目標はスペクトルデータその他の情報に矛盾しないすべての構造を列挙するというところに置かれている。

一般的にいうと未知化合物の構造推定は次のような過程を経るものといえよう。

- 1) 与えられたデータから部分構造を推定する。この際可能性のあるものをすべて列挙する必要がある。
- 2) 推定された部分構造をつなぎ合わせて全構造を組み立てる。ここでもあらゆる可能性がもれなく網羅されなければならない。
- 3) 組み立てられた全構造と最初に与えられたデータとの間の矛盾の有無を検査する。その結果妥当なものを候補構造式として提出する。

1 の作業を熟練した化学者と同等の水準で行うことのできるプログラムを作成することは不可能に近い。しかしながら人間にとって不得手で、コンピュータが最も得意とするところは、1), 2) で言っている「可能性をすべて列挙、網羅することである。以下に述べる二つのシステムはこの点で人間に数等まさっており、有用なもの

となっている。

1 Heuristic DENDRAL

このシステムは上に述べた構造推定の過程のすべての段階を完全に行うことのできる最初のものとして報告¹⁾された。Heuristic DENDRAL は次のような流れで未知化合物の分子式と質量スペクトルからその構造を推定する。

- 1) 質量スペクトルデータを解釈して構造中に必ず存在しなければならない部分構造のリスト (GOODLIST) と存在してはならない部分構造のリスト (BADLIST) を作る。
- 2) 分子式からすべての可能な構造異性体を組み立てる。それらの構造異性体のうち GOODLIST 中の部分構造をすべて含み、かつ BADLIST 中の部分構造を一つも含まないものだけを候補構造式として残す。
- 3) 各候補構造式についてその質量スペクトルを予想する。
- 4) 予想されたスペクトルと入力したスペクトルを比較し一致度の高いものから候補構造式に順位をつける。

最初の論文で使われた例でこの各段階が具体的にはどのように行われていくかを紹介していこう。今、分子式 $C_9H_{18}O$ の未知化合物のスペクトル (図-1) が与えられたとする。

まず 1) の段階で GOODLIST, BADLIST に登録すべき部分構造の推定が行われる。この推定のための経験則は、

「もし……であれば、……である」

という情報科学の分野でプロダクション規則と呼ばれる形式で記述され記憶されている。この入力データに適用される規則の一つは以下のようである。

もし、スペクトル中に

a $X_1 + X_2 = M(\text{分子量}) + 28$ が成り立ち、

図-1 未知試料のマススペクトルデータ

- $X_1 - 28$ が強いピークであり、
- $X_2 - 28$ も強いピークであり、
- 少なくとも X_1 と X_2 のどちらかが強いピークであるような 2 本のピーク X_1, X_2 が存在するならば、その化合物はケトンである。

この規則はジアルキルケトンの質量スペクトルに広く認められる 図-2 に示したフラグメンテーションに基づいたものである。このようないくつかの規則を、与えられた質量スペクトルに適用した結果、GOODLIST には C_3-CO-C_3 というタイプのケトンが登録され、BADLIST には 図-3 に示したような部分構造が登録された。図-3 にはまた、それぞれの部分構造から予想されるフラグメントイオンが示されている。図-1 のスペクトルと照合すれば、それらのフラグメントイオンに由来するピークが存在しないことが容易におわかり頂けよう。

次は 2) の段階で、この GOODLIST, BADLIST を満足するすべての構造異性体を列挙すると 図-4 に示す 8 個であった。ちなみに分子式を満足するすべての構造異性体の数は 4,745 個である²⁾。

続いて 3) の質量スペクトルを予想する段階である。この予想は有機マススペクトロメリーの経験則に基づいて行われるものであるが、ここではその詳細は省略し結果だけを 図-5 に示した。括弧の中の 2 つの数値は m/z 値と相対強度である。

最後に 4) でこの予想ス

図-2 ジアルキルケトンのフラグメンテーション

図-3 BADLIST に上げられた部分構造

図-4 候補として残された構造式

- 1 (43・44) (71・100) (72・13) (99・55) (100・13) (142・9)
- 2 (43・44) (71・100) (72・4) (99・55) (100・2) (114・2) (142・9)
- 3 (43・44) (71・100) (86・4) (99・55) (114・4) (142・9)
- 4 (43・42) (71・100) (86・4) (99・57) (114・4) (142・9)
- 5 (43・50) (71・100) (99・50) (100・15) (142・10)
- 6 (43・50) (71・100) (99・50) (100・2) (142・10)
- 7 (43・50) (71・100) (99・50) (114・2) (142・10)
- 8 (43・48) (71・100) (99・51) (114・2) (142・10)

図-5 各候補構造式に対し予測されたスペクトル

ペクトルと入力スペクトルを比較することにより **5** と **6** の構造式だけが最終的に生き残った。図-1 のスペクトルは **5** の化合物のものである。

その後、この研究グループはエーテル ($C_nH_{2n+2}O$)、アミン ($C_nH_{2n+3}N$)、特定のステロイド類をそれぞれ対象とした独立のシステムを開発した。しかし、このように化合物のタイプを限定したシステムは、たとえその範囲内では非常に有効なものであっても、未知化合物の構造決定という見地からは実用的といえるものではない。このことは実用化をめざした彼らの次のシステムが、部分構造推定の部分をコンピュータープログラムで行うことをあきらめ、化学者が入力した任意の部分構造と分子式から全構造を組み立てるシステム CONGEN³⁾ 及びその改良版 GENOA⁴⁾ へと変わっていったことから明らかである。

2 CHEMICS

次に筆者らが開発した有機化合物の構造推定システム CHEMICS⁵⁾ の概要を紹介する。

前に述べたように、このシステムを開発するにあたって目標としたのは、入力データ（分子式、スペクトルデータ、その他）に矛盾しないすべての可能な構造異性体を列挙すること、列挙された構造異性体が唯一であればそれが正解であること、もし複数個であれば必ず正解を含むこと、である。

図-6 に CHEMICS の概念図を示した。このシステムも Heuristic DENDRAL と同様、部分構造推定、構造組み立て、構造検定の三つの部分から成り立っている。

入力データは現在、有機化合物の構造推定に広く使われており、また豊富な情報を与えてくれる ^{13}C NMR, 1H NMR, IR の各

図-6 CHEMICS の概念図

スペクトルデータ及び分子式である。対象としている未知化合物は C, H, O からなる有機化合物である。現在この対象範囲を C, H, N, O, S, ハロゲンまで拡大した新しいシステムがほぼ完成の域に達しているが、これについては稿を改めて述べたい。以下に 図-6 の各部分について順を追って説明して行く。

2.1 部分構造推定部

この部分はスペクトルデータを解析して存在する可能性のある部分構造をすべて列挙する。具体的には、あらかじめ設定してある 188 種の部分構造（これを構造組み

表-1 CHEMICS で使用しているコンポーネント

コンポーネント No. 構造	コンポーネント No. 構造	コンポーネント No. 構造	コンポーネント No. 構造
11~6 $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3-\text{C}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	41~46 CH_3CH_2-	114 $\text{H}-\text{C}^+$	142, 143 $>\text{C}=\text{}$
7~12 $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ -\text{C}- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	47~61 $\text{CH}_3-\text{CH}-$	115 $\begin{array}{c} \text{H} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \end{array}$	144, 145 $=\text{C}=\text{}$
13~18 $\begin{array}{c} \\ \text{CH}_3-\text{C}- \\ \end{array}$	62~88 $-\text{CH}-$	116 $-\text{C}\equiv\text{CH}$	146 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O}^+ \end{array}$
19~25 $\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \diagdown \\ \text{CH}- \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$	89~109 $-\text{CH}_2-$	117, 118 $-\text{CH}=\text{}$	147~153 $-\text{O}-$
26~31 $\text{CH}_3\text{O}-$	110 $\text{CH}_2=\text{}$	119~124 $-\text{OCHO}$	154~174 $-\text{CO}-$
32~34 CH_3-	111 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{CH}_2 \quad \text{O} \end{array}$	125~127 $-\text{OH}$	175 $=\text{C}=\text{O}$
35~40 $\text{CH}_3\text{CO}-$	112 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{H} \quad \text{O} \end{array}$	128~133 $-\text{COOH}$	176 $-\text{C}\equiv\text{C}-$
	113 $\text{HO}-\text{C}^+$	134~140 $-\text{CHO}$	177~182 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O}^+ \end{array}$
		141 $\begin{array}{c} \text{O} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{O} \end{array}$	183~188 $-\text{C}-$

+: 芳香環の一部を示す

立ての要素という意味で以下 コンポーネントと呼ぶ) がその分子中に存在しうる最大数と最小数を決定することである (表-1 参照)。

この 188 種のコンポーネントは、スペクトルデータからその存在が推定できること、互いに重なる部分のないこと、その組み合わせによって対象とする範囲 (C, H, O の組み合わせでできる構造式のすべて) であればどのようなものでも組み立てられること、といった条件のもとに設定されたものである。コンポーネントによっては同じ構造を持つものが複数個設定されているが、これらは分子中でそれぞれ異なった環境にあり、したがってスペクトルデータに差があるものである。

これらのコンポーネントのおのおのには 表-2 に示すいくつかのパラメーターがそれぞれ設定されている。NC, HD, NO はそれぞれのコンポーネントが構造式中に存在するのに必要な炭素数、不飽和数 (環と不飽和結合の合計)、酸素数を意味している。たとえば 1 番のコンポーネントが存在するためには少なくとも炭素が 4 個、酸素が 1 個必要であり、不飽和は少なくともよいということである。未知化合物の分子式とこの 3 種のパラメーターによって存在しえないコンポーネントがふるい落とされ組み立てられる構造式の範囲がある程度限定できるわけである。

これに加えておのおののコンポーネントにはスペクトル中にそれが与えるシグナルの出現範囲がパラメーターとして設定してある。与えられたスペクトルデータとこのパラメーターによってさらにふるい落としが行われるわけである。表-2 に $^1\text{H-NMR}$ と $^{13}\text{C-NMR}$ についてのパラメーターを示してある。この手続きの詳細については省略しここではある未知化合物について 図-7 に示すデータを入力したとき、どのようにコンポーネントがふるい落とされたかを 図-8 に示した。この試料の場合、最終的には 29 種のコンポーラントが生き残り、またその存在しうる最大数、最小数が 表-2 に示したように決定された。

2.2 構造組立部

部分構造推定部で存在する可能性ありとされたコンポーネントを使って実際に構造式を組み立てるのがこの部

$\text{C}_9\text{H}_{14}\text{O}$

IR		$^1\text{H-NMR}$		$^{13}\text{C-NMR}$		mult.
posi.	int.	posi.	int.	posi.	int.	
2980	65	5.74	45	24.4	168	4
1670	86	5.70	40	28.3	455	4
1440	37	5.66	25	33.5	89	1
1385	57	2.13	239	45.2	238	3
1375	51	2.07	228	50.8	212	3
1300	42	1.91	342	125.4	249	2
1280	45	1.00	712	159.9	108	1
1245	47			199.2	86	1
900	32					

図-7 CHEMICS への入力データの一例

表-2 コンポーネントのパラメーターの例

No.	構造	NC	HD	NO	$^1\text{H-NMR}$	$^{13}\text{C-NMR}$
1	$\text{CH}_3-\text{C}-$ CH_3	4	0	1	84.0~60.0	26.02~31.13
2		8	3	0	96.0~72.0	24.47~33.57
3		5	1	1	90.0~60.0	25.48~34.04
∴	∴	∴	∴	∴	∴	∴
10	$\text{CH}_3-\text{C}-$ CH_3	6	1	0	90.0~48.0	14.72~36.27
11		6	2	0	90.0~48.0	10.12~36.27
12		5	0	0	89.4~36.0	6.80~32.61
∴	∴	∴	∴	∴	∴	∴
106	$-\text{CH}_2-$	3	1	1	220.0~108.0	20.46~56.42
107		4	1	0	162.0~102.0	18.88~53.09
108		4	2	0	180.0~114.0	13.27~54.14
109	$-\text{CH}_2-$	3	0	0	144.0~0.0	14.66~57.16
∴		∴	∴	∴	∴	∴

分の機能である。具体的には以下の 3 段階で行われる。

a) 組み合わせ：ここでは選出されたコンポーネント群の中から分子式を満足するすべての組み合わせをもなく作成する。

表-3 最終的に生き残ったコンポーネント

No.	CMP	Substructure	Max.	Min.
1	10	GEM-DIMETHYL-(D)	1	0
2	11	GEM-DIMETHYL-(T)	1	0
3	12	GEM-DIMETHYL-(C)	1	0
4	14	$\text{CH}_3-(\text{C})-$ (Y)	2	0
5	17	$\text{CH}_3-(\text{C})-$ (T)	2	0
6	33	CH_3- (D)	2	0
7	38	$\text{CH}_3\text{CO}-$ (D)	1	0
8	40	$\text{CH}_3\text{CO}-$ (C)	1	0
9	106	$-\text{CH}_2-$ (C)(K)	2	0
10	107	$-\text{CH}_2-$ (C)(D)	2	0
11	108	$-\text{CH}_2-$ (C)(T)	2	0
12	109	$-\text{CH}_2-$ (C)(C)	2	0
13	118	$-\text{CH}=$ OLEFIN	1	0
14	143	$:\text{C}=$ OLEFIN	1	0
15	144	$=\text{C}=$ KETENE	1	0
16	145	$=\text{C}=$ ALENE	1	0
17	146	FURAN (O)	1	0
18	153	$-\text{O}-$	1	0
19	172	$-\text{CO}-$ (C)(D)	1	0
20	173	$-\text{CO}-$ (C)(T)	1	0
21	174	$-\text{CO}-$ (C)(C)	1	0
22	175	$\text{O}=\text{C}=$	1	0
23	177	Y (O)	1	0
24	182	Y (C)	1	0
25	184	C (Y)	1	0
26	185	C (K)	1	0
27	186	C (D)	1	0
28	187	C (T)	1	0
29	188	C (C)	1	0

b) 整合性の検定：このようにして作り出されたコンポーネントの組み合わせ（これをコンポーネントセットと呼ぶ）は必ずしも入力したスペクトルデータを満足するものではない。なぜなら、部分構造推定部においては個々のコンポーネントが帰属しうるシグナルがスペクトル中にあればそのコンポーネントは生き残ることになっている。したがって、スペクトル

全体と1組のコンポーネントセットとの間に矛盾が生ずることがある。このようなコンポーネントセットを排除するのがこの段階の機能である。これについてはすでに詳しく解説してある⁶⁾ので、ここでは省略させて頂く。このような検定を行った結果、図-9の5組のコンポーネントセットが実際の組み立ての段階に廻される。

c) 構造組立：コンポーネントをつなぎ合わせて構造を組み立てる作業は、セット中のコンポーネントの数が数個程度であれば手作業でも容易にできる。しかし、コンポーネントの数が増えるにしたがって可能性は階乗で増えて行くのであらゆる可能な構造式をもれなく、重複なく、しかも効率良く組み立てるコンピュータアルゴリズムが必要となる。CHEMICS では結合スタック法⁷⁾というアルゴリズムによって全構造の組み立てを行っている。図-9の5組のコンポーネントセットから最終的に

() の中には、結合相手を指定する記号、(C): SP³炭素、(D): カルボニル以外のSP²炭素、(K): カルボニル炭素、*は相手が任意であることを意味している。

図-9 最終的につくられた5組のコンポーネントセット

図-8 コンポーネントのふるい落とし

コンポーネント

図-10 CHEMICS で得られた答

は図-10に示した12個の構造式が組み立てられた。

2.3 構造検定部

このようにして組み立て上げられた候補構造式は一応スペクトルデータに矛盾がないものと見なすことができる。「一応」という言葉を使ったのは、このプログラムに組み込み得たスペクトル解析の能力及ぶ範囲という意味である。したがって、熟練した化学者の目で見ると明らかにありえないような構造式がこれら候補構造の中に含まれていることがある。その一つの例として分子の対称性に関するものがある。対称性の高い構造を持った分子では等価な炭素が幾組か存在し、¹³C NMR スペクトルのシグナル数が炭素数よりも少なくなる。この構造検定部ではこの原理に基づいて候補構造式の1つ1つにつき¹³C NMR スペクトルのシグナル数を予測し実際の入力データのそれと比較することによって更に候補を絞るというを行っている。ただし現在は候補構造式として提出されるものが構造異性体であり、立体異性体までは取り扱っていないので、予測された数値にある程度の許容範囲を見込む必要はある。したがって、この部分は使用者との対話形式で運用されている。

2.4 任意の部分構造の入力

以上に述べた3つがCHEMICSの主要な構成要素であるが、この外にCHEMICSには使用者の責任において任意の部分構造を入力できるという機能が備わっている。

使用者は多くの場合、その未知試料についてなんらかの構造についての知見を持っているので、それが入

力できれば候補構造式の数を減らすことに役立つ。

しかし、時には使用者の勘違いなどで明らかにデータと矛盾する部分構造が入力される場合が考えられる。そのような誤りを防ぐために、入力部分構造に対しても検査を行う。具体的にはその部分構造を CHEMICS のコンポーネントに分解し、そのすべてが 2・2 の b) の過程を経たコンポーネントセットのどれか 1 組の中に存在していなければならない。この条件が満足されなかった場合は、その部分構造は受けつけられないことになる。

たとえば 図-7 に示したスペクトルデータの外に、

という部分構造を入力したとしよう。これをコンポーネントに分解すると、

となり、図-9 のコンポーネントセットのうち 4 と 5 がこれらすべてを含んでいる。したがってこの部分構造は採用され、最終的には 図-10 の 9 と 12 だけが生き残ることになる。図-7 に示したスペクトルデータは 12 のものである。

おわりに

以上に未知化合物の構造推定システムの代表的なものを二つ紹介した。これら以外にも多数のシステムが報告されているが、紙面の都合で割愛し末尾に参考文献^{8)~17)}としてまとめさせて頂いた。

この種のシステムの宿命として、スペクトルの理論に忠実であろうとすると対象とする範囲が非常に限定されたものとなってしまう、また経験則だけに頼ると答のあいまい性が増す(候補構造式の数が増える)。この両者をうまく組み合わせて実用的なシステムにできるだけ近づけたいというのが筆者らの日ごろの念願である。

(昭和 58 年 6 月 27 日受理)

文 献

- 1) A.M. Duffield, A.V. Robertson, C. Djerassi, B.G. Buchanan, G.L. Sutherland, E.A. Feigenbaum, J. Lederberg, *J. Am. Chem. Soc.*, **91**, 2977 (1969)
- 2) H. Abe, T. Okuyama, I. Fujiwara, S. Sasaki, in preparation
- 3) R.E. Carhart, D.H. Smith, H. Brown, C. Djerassi, *J. Am. Chem. Soc.*, **97**, 5755 (1975)
- 4) R.E. Carhart, D.H. Smith, H. Brown, C. Djerassi, *J. Org. Chem.*, **46**, 1708 (1981)
- 5) S. Sasaki, I. Fujiwara, H. Abe, *Anal. Chim. Acta*, **122**, 87 (1980); S. Sasaki, H. Abe, Y. Hirota, Y. Ishida, Y. Kudo, S. Ochiai, K. Saito, T. Yamasaki, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **18**, 211 (1978)
- 6) 佐々木慎一, 阿部英次, 現代化学, No. 119, 34 (1981)
- 7) Y. Kudo, S. Sasaki, *J. Chem. Doc.*, **14**, 200 (1974)
以下の論文は本文中に引用していないが主要なもの。
- 8) B. Pattersson, R. Ryhage, *Anal. Chem.*, **39**, 790 (1967)
- 9) K. Biemann, C. Cone, B.R. Webster, G.P. Arsenault, *J. Am. Chem. Soc.*, **88**, 5598 (1966)
- 10) M.E. Munk, C.S. Sodano, R.L. McLean, T.H. Haskell, *J. Am. Chem. Soc.*, **89**, 4158 (1967)
- 11) L.R. Crawford, J.D. Morrison, *Anal. Chem.*, **43**, 1793 (1971)
- 12) G. Beech, R.T. Jones, K. Miller, *Anal. Chem.*, **46**, 714 (1974)
- 13) N.A.B. Gray, *Anal. Chem.*, **47**, 2426 (1975)
- 14) H.E. Dayringer, G.M. Pesyna, R. Venkataraghavan, F.W. McLafferty, *Org. Mass Spectrom.*, **11**, 529 (1976)
- 15) H.B. Woodruff, C.R. Snelling, Jr., C.A. Shelly, M. E. Munk, *Anal. Chem.*, **49**, 2075 (1977)
- 16) L.A. Gribov, M.E. Elyashberg, V.V. Serov, *J. Mol. Struct.*, **50**, 371 (1978)
- 17) L.A. Gribov, M.E. Elyashberg, V.N. Koldashov, I. V. Plotnjov, *Anal. Chim. Acta*, **148**, 159 (1983)

会のページ

《9 月の行事》

理事会

No. 234 理事会: 30 日, 油脂工業会館会議室, 委任状提出を含む出席者 27, 議事: 前回議事録確認, 行事・入退会・会計報告, 各業務委員会報告, 各支部報告, 運営委員会報告その他の審議。

委員会

No. 132 企画委員会: 14 日, 本会事務所, 出席者 10, 議事: 59 年 2 月講演会企画, No. 31 夏季ゼミナールの件他審議。

No. 95 総務委員会: 19 日, 同所, 出席者 4, 議事: 事務局職員給与改訂の件他審議。

No. 210 運営委員会: 19 日, 同所, 出席者 9, 議事: 退会申出者検討, 各業務委員会報告, 油化学協会賞選考委員会・役員候補者推薦委員会委員選考の件他。

No. 295 編集委員会: 22 日, 同所, 出席者 13, 議事: Vol. 32, No. 11 編集要綱案承認, 原稿審査状況報告, 来年度特集号原案検討他の審議。

用語小委員会(編集委員会): 22 日, 同所, 出席者 5, 議事: 學術用語集改訂原案の検討他。

昭和 58 年度油化学協会賞推薦委員会: 27 日, 同所, 出席者 5, 議事: 昭和 58 年度油化学協会賞推薦の件他。