

1. 総合的水質指標の必要性

水質評価には化学、生物学および物理学の指標と数多いが、どれをとり、どれを重く見るかの一般論は難しい。各指標には個々の意義や持味があるが、いま、総合的あるいは包括的な指標を望む声が高まっている。BOD, COD, TOC, DOP, POC, $\text{NH}_4\text{-N}$, $\text{NO}_3\text{-N}$, 無機水銀などの化学的指標の測定は規格化されているものが殆どで、規格は多少のバラエティはあるが客観性を有する。ところが指標相互間の interrelation が個々のケースで異なるのが厄介である。一方、生物学的指標の場合、綱・目・属・種の同定は客観的にできるが、水質ヒエラルキーを見ようとする、陸水学、汚水生物学でいうような面倒な分類になり、主観的要素も加わり、階級化や判定に時間がかかる。Shannon (1948-1949) による Diversity Index (多様性指数) が生物学分野で利用されるのは、生物相をエントロピーで定量評価しようという、注目すべき試みである。エントロピーは元来、熱力学、物理化学の概念であるが、情報エントロピーのように対象を確率変数として扱えば、求値は比較的容易で、それなりの価値をもつ。この方法では、変量を discrete な統計量として扱うのが常で、そうすれば化学量であっても生物量であっても同じレベルで論ずることができる。しかし熱力学エントロピーは、analogous とはいえ単位もちがう。ともかくエントロピー理念の興行は広く、水質評価のみならず多くの環境分野でハードな総合的指標の一つとして利用しうるのであろう。

2. 情報エントロピー

Information Theory では、情報処理においてエントロピーが不可欠の要素になっている。情報源から受ける情報量は、受信後と前の、事象の受信側での生起(受信)確率の比をとり、その比の対数で定義されるが、情報伝達系に noise がなければ、

$$I = \text{情報量} = -\log(\text{受信前における情報対象事象の生起確率}) \quad \text{-----}(1)$$

で、対数の底に 2 を用いて binary unit にするのが通例である。この情報量を Brillouin (1956) は事象の生起しうるケースの数 p' と、定数 $K = 1/\ln 2$ を用い、 $I = K \ln p'$ として熱力学エントロピーと相似であることを示した。一般情報理論では p' の代りに事象の生起頻度 p を用い、 $I = -\log_e p$ であらわす。

离散型情報源の平均情報量

変量 x の生起が discrete で、 i 回のシグナルによって選ばれる情報量の平均値が、一般に用いられる情報エントロピーの式である。

$$H = -\sum_i p_i \log p_i, \quad p_i \text{ は } i \text{ 番目の情報対象事象の生起確率} \quad \text{-----}(2)$$

情報エントロピーには記号 H が常用される。一般に物理化学ではエントロピーを S , エンタルピーが H なので紛らわしいが、この論では以下どちらのエントロピーも H で示す。

連続変数の場合

x が連続で、確率密度関数 $p(x)$ が対象となる時、単一変数の場合の情報エントロピーは次のようになる。

$$H_c = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left[-\sum_i p(x_i) \Delta x_i \log \{p(x_i) \Delta x_i\} \right], \text{ または } H_c = -\int p(x) \log p(x) dx \quad \text{-----}(3)$$

离散型で変量が2個 (x, y) の場合

自由度2の系でいえば、変量 x, y がそれぞれ値 i, j を独立にとる場合のエントロピーは、

$$H(x, y) = -\sum_{i,j} p_{ij} \log p_{ij} = H(x) + H(y) \quad \text{----- (4)}$$

であるが、 x と y とが独立でない場合はこの相加法則が成立せず、次の不等式が成立つ。

$$H' \equiv H(x, y) - H(x) - H(y) < 0 \quad \text{----- (5)}$$

3. 物理化学的な視角

情報エントロピーに対し、熱力学エントロピーを化学的系にあてはめる場合、理想気体の状態方程式 $PV = nRT$ (n は気体モル数, R は気体定数) を基礎として, Gibbs の自由エネルギー G を介しエントロピーを求めることになる(溶液の場合は化学ポテンシャル)。いま, PV 仕事のための可逆的な系において

$$\left. \begin{aligned} dG &= VdP - HdT \\ H &= -(\partial G / \partial T)_P = -N(Nagentropy) \end{aligned} \right\} \quad \text{----- (6)}$$

多成分混合気体において, n_i を i 番目の気体のモル数とすると, 分圧は $P_i V = n_i RT$ で表され, i 番目の気体の混合による自由エネルギーの増加は,

$$\begin{aligned} \Delta G_i &= G_i - G_i^\circ = n_i RT \ln P_i \quad (G_i^\circ \text{は1気圧における標準自由エネルギー}) \\ \Delta H_i (\text{増加エントロピー}) &= -n_i R \ln P_i \\ \text{ただし } \Delta H_i &= H_i - H_i^\circ, \quad H_i^\circ = - (dG_i^\circ / dT) \end{aligned} \quad \text{----- (7)}$$

全成分気体による増加エントロピー ΔH は

$$\Delta H = \sum_i \Delta H_i = -\sum_i R n_i \ln P_i = -R \sum_i n_i \ln P_i \quad \text{----- (8)}$$

一方溶液の場合は, 理想系であれば $dG = -SdT + VdP + \sum_i (\partial G / \partial n_i)_{T,P} n_{i,j} dn_{i,j}$ から出発する。

4. 水質評価等への応用例

情報エントロピーを多様性指数 DI として用いる場合と, 直接エントロピーを求める場合とに分れる。

情報エントロピー～ DI による評価例-(1)

右図は, 1968～1972の間に於けるK湖の植物プランクトン, 動物プランクトンの消長を, 多様性指数の変化で見た結果である(スケッチ)。水域富栄養化に伴う, 6～8月に見られる, 優占種藻類の異常増殖のようを見ることが出来る。

情報エントロピーによる評価例-(2)

活性汚泥培養過程における原生動物相の多様性指数による評価と処理成績との相関

情報エントロピーによる評価例-(3)

2次処理水に対し, 活性炭処理を行う前提でオゾン処理を行った結果, 高分子の低分子化と分子量分布の単純化→エントロピー低下が起る例(図-2)。

その他: 略。

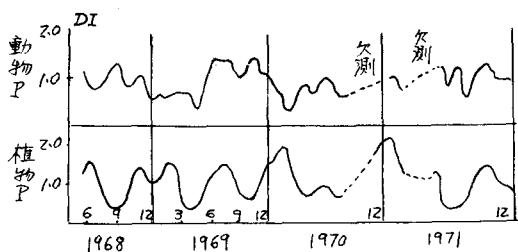


図-1. K湖における植物, 動物プランクトンの種別の個体数を対象とした多様性指数 DI の変化(スケッチ)

