〈講座〉

環境指標としてのエントロピー

(1) 概 説

合 田 健*
Takeshi GŌDA

1. は じ め に

エントロピーという言葉聞いたことがないという人はおそらくないだろう。しかし、何度かこの言葉を耳にし、活字で目にした人も、それがどういうものか詳しく説明して欲しいと言われると窮してしまうか、本を持ち出さないとはいえないとか、説明を聞いたことはあるがどうも判り難いと思う人が多いと思う。

学校時代、化学の時間や熱力学の講義で聞いたが、それが環境問題にどのような係わりがあるのかと思われるであろう。しかし、物理学者が指摘している¹⁾ように、エントロピーという語は従来、それに関係の深い分野の中だけで語られていたのが、最近はもっと広い範囲で、日常的にも使われるようになった。

1) 環境問題や水質の良否にどうつながっているのか
エントロピー(entropy)の語源は「変化」(εντροπη)とか「方向づける」(τροπευ)という意味のギリシャ語に発しており、いろいろな形の数式であらわすことができるが、その理念は、組織や社会、あるいは系の秩序の整いかた、乱れかたに密接に結びついている。システムという言葉は「体系」「系」あるいは「組織」などと訳されるが、それを構成しているいろんな要素や変量が、ある数値あるいは組合せの時と別な組合せの時とで状況が違うし、人間の眼にも違って映ずる。たとえば山道を歩いていて眼にうつる景色が緑一色の時と、種々の花が咲いていたり、あるいは色合を異にする紅葉で錦のような場合とで明らかに違う。実は緑一色の場合がエントロピーが低いのである。同じ緑一色であっても、それらの樹木が、たとえば真直ぐな杉ばかりの樹林と、そうでなくさまざまな広葉樹、針葉樹あるいは灌木で構成されている時とでやはり違う。この場合も前者の方がエントロピーが低いのである。それは何故か、については追々説明するとして、読者になじみの深い水質汚濁の問題に触

れよう。

ひと口に言えば汚れた水はエントロピーが高まった状態といえる。しかし、通常の水質の論議では、同じ水の汚れでも大腸菌を含む病原菌などで汚染された状態と、普通の一般細菌や単細胞藻類のみが存在する状態とではどちらがより重視されるだろうか。答は明らかに前者である。その理由は、汚濁の内容がより問題でより危険だからである。評価する側の人間にとって、より害悪をもたらすであろうという衛生学的な判断からそう感ずるのが当然であるが、この両者をエントロピーで評価するとどうなるか。その場合は、存在する「植物」の属(genus)、種(species)などの別と、それぞれの個体数(あるいは濃度)によって違い、必ずしも病原菌のある方がエントロピーが高くなる。エントロピーによる評価の立場は、人間と汚染物質の相互関係、つまり毒性の強弱といった相対的な立場に立つのではなく、存在する不純物—動物、植物、化学物質などの多様さと混入している量、あるいは密度から評価を下すのであって、その立場は絶対的である。だから数字的には、水中に水銀が1 ppm、カドミウムが5 ppm含まれている系よりも、マグネシウムが10 ppm、ナトリウム5 ppm、カリウム7 ppmに加えてアニオンがそれらに対応するだけ存在する系の方が多分エントロピー値が高くなる。もっとも、ppmの数値で計算できるのは情報エントロピーの場合であって、熱力学のエントロピーの数値を求める時は化学量論的な計算であり、モルやモル分率の尺度を使わねば比較はできない。

こうしたエントロピーの一面を見て、それでは自分たちの水質論議になじまない、と片付けるのはいささか気短かである。エントロピーが教えてくれるのは、繰り返すが系の無秩序、乱雑さのていどなのである。汚濁という無秩序さは、放っておくとますますひどくなる。それを放置できず秩序を戻そうとすると必ず何がしかの仕事

* 国立公害研究所 〒305 茨城県筑波郡谷田部町小野川16-2, National Institute for Environmental Studies (16-2 Onogawa, Yatabe-cho, Tsukuba-gun, Ibaraki, Japan 305)

をせねばならぬ。水質浄化、水処理がまさにそれである。難しい言いかたをする時はエントロピーにマイナスの符号をつけたもの、すなわち反エントロピー (negentropy, ネグエントロピーともいう) を加える、という。

水質の例をあげたが、大気汚染とその防止、廃棄物の放出とその収集分別、焼却処理などは同じことである。広く環境問題一般 - 自然環境の保全や植生の評価、地域開発、土壌生態系などについて、ニュアンスはそれぞれ異なるがみな同じようにエントロピーや反エントロピー (またはネグエントロピー) が保っている。

2) エントロピーはどういう性格をもつか

上述の例では、単純な系の方がエントロピーが低いという感じを持たれたかもしれない。ここでエントロピー本来の性格に触れる。

エントロピーが人々によく理解されない理由の一つは、それが保存されず、放置するとふえて行く性格の量だという点にある。ふだんわれわれが対象にしている物理量や化学量は、エネルギー、質量、運動量のようにすべて保存則に従う。この保存則があるおかげで、ある特定物質の動きや変化を調べる時、ほとんどといってよいほど物質不滅の法則をいろいろな式の形に書いて、未知量の大きさやその変化過程を追う。ところがエントロピーの場合はそうは行かない。可逆過程ならともかく、一般の不可逆過程では系内のエントロピー生成があるので、その生成率に関して面倒な計算をせねばならない。ただしこの不可逆過程は熱力学でも比較的近年に開拓された分野で、それを調べる前に理想的な可逆系の熱力学を学ぶのが順序であろう。

古典熱力学では、物質不滅則と並ぶエネルギー不滅則を熱力学第一法則と呼び、通常次の形であらわす。

$$\Delta U = q + w \quad (1)$$

あるいは微分形にして

$$dU = dq + dw \quad (1)_1$$

ここに U は系の内部エネルギー、 q は外界とやりとりされる熱量、 w は系でなされる仕事である。温度を T とすると系のエントロピーは dq/T なので、その値を求めたり、性質を調べるのにまず (1), (1)₁ 式が基礎となる。これに加えて第二種の永久運動が不可能であることを内容とし、熱移動、仕事の行われる方向を定める熱力学第二法則、更に絶対零度でエントロピーが 0 となることを内容とする熱力学第三法則があり、これらがエントロピーの性質調べに欠かせないものである。

ところで、自然のままに任せておくとエントロピーが増加することの理解に、分子の性質を示す初歩的な例と

図 1 容器中の気体分子配置の変化

して図 1 を描いた。熱力学のエントロピーは統計力学の立場からいうと、系の分子配列に係っている (3) 式で説明)。図のように、左右に分れた球形容器中に、初めは左側に窒素ガス、右側に酸素ガスのみを入れておく (a) 図)。容器間の栓を開いて長時間放置すると両種の気体分子が、微視的には気体分子個々の運動により、巨視的には拡散によって、混りあい、ついには b) 図のように左右とも同じ組成の混合気体になってしまう。この場合 a) の状態は人為的には実現できるが、自然には極めて起りにくい状態であり、逆に b) の状態はもっとも起り易い。つまりこの系でもっともエントロピーが高い状態である。更に長時間放置しても、状態が a) に戻ったり、それに近い状態になる確率は極めて低い。人間以外でそのような仕事をすると考えられているのが Maxwell の魔物⁵⁾ (Maxwell Demon) である。

図 1 の現象を敷衍して行くと、宇宙のエントロピーは常に増大し、いずれは極大に達して熱的終末を迎えるという考えにつながる。太陽系でいうと、太陽で起っている核反応によるぼう大なエネルギー・熱放散がある一方、土星や木星のような冷え切った天体がある。つまりこの局所宇宙ではまだまだエネルギー、質量、熱が偏在している。しかし、その太陽もいつかは燃え尽き、他の恒星系でも遅かれ早かれエネルギーや熱の放散が終ってしまい、遠い将来には宇宙のどこにも熱や密度の勾配がなくなり、したがってエネルギー移動もない状態が起こるのではないか。これが宇宙の終末で、その時はもう人間も生物も星もなく、特定の場所にエネルギーや質量が偏在していることがないので、宇宙にはもはや何も起こらない。そこには不可逆現象がないのだから時間というものすら無意味になっている。¹⁾ こういう宇宙の終末観は Boltzmann や Maxwell らの時代に考えられ、現在では若干疑問を持たれているものの、その可能性は否定されていない。エントロピーの性質が研究されたこととこのような宇宙観とはつながりがある。

われわれの廻りで、このエントロピーのように保存されず、放置したらどんどん増大するという量が他にあるだろうか。化石燃料や天然ガスなどは明らかに有限だし、太陽エネルギーにも限りがありそうだ。それでは、そういう物質不減則やエネルギー不減則の埒外にあるものとして情報はどうか。情報量というものは人間の歴史始まって以来今日までふえつづけ、今後も人間あるかぎり、つまり情報源と受信者とがあるかぎりふえ続ける筈である。それは、すべての情報がすべての人に行きわたるまで続く。この最終状態はスケールの差こそあれ前述の宇宙の熱的終末と何とよく似ていることか。おそらく、人間が減んでもより高等な生物ある限りこの現象は続くだろう。つまり情報とエントロピーとは大変似ている。いや似ているというより情報そのものが一種のエントロピーなのだ、という認識が情報理論の基底になっている。実はわれわれが環境指標と考えるエントロピーで、この情報エントロピーも重要な意味をもっている。

次節で紹介するエントロピー式の三つの型のうち三番目、すなわち情報エントロピーの式(4)から誘導される、多数の独立した情報量の平均値(平均情報量) H は、生物学や生態学で用いられている Shannon-Margalef の多様性指数³⁾と同じ性質を有する。このエントロピーは本来の熱力学的エントロピーと違った単位で、別な物理的意味をもつが、統計力学的には同じバックグラウンドに立つものである。その環境問題における応用例は、たとえば開発の進行による土地利用形態の変化の評価、湖沼や海洋、底質中でのプランクトンや原生動物の多様性、あるいは活性汚泥の浄化の原動力となる微小動物の種と個体数分布の評価など、対象は極めて広い。現に活性汚泥中の原生動物について Shannon-Margalef の多様性指数をとると、図2のように BOD 除去率と関係があるのが認められる。

3) 講座の進めかたと数式等の扱い

エントロピーという量がいっぱう変わった特性をもつこと、それが熱力学、統計力学あるいは情報理論などからそれぞれ体系的に論述されうること、この量を環境問題の種々の面に指標として使うとさまざまな新しい評価、

図2 活性汚泥原生動物の多様性指数と水質

認識が可能になりそうなことを述べた。以下この講座は、それを詳説し、わかり易い記述から漸次複雑な数式へと移行して行くつもりである。

数式は苦手という向きによく理解して貰えるよう、式の誘導はできるだけ丁寧にやりたい。已むを得ず省略する場合はその過程を記したなるべく手に入り易い文献を紹介する。

今回は第1回なので、あまり数式を使わず、先ず重要なエントロピー公式三例を次節で紹介し、それぞれの由来と関係を抽象的に述べる(数式による説明等は後に譲る)。つぎに、理解され易い日常的な例をいくつか引合に出して、エントロピーの概念をよりよく理解されるようにしたい。

2. エントロピーの三つの式形

エントロピーを論ずる上で、次の三つの式はいずれも基本理念として大切である。時代を追って順番に記す。

1) 熱力学、熱工学で扱うエントロピー公式

$$\Delta S = \frac{\Delta q}{T} \quad (2)$$

S はエントロピー (SI 単位で J/K)、 ΔS が熱や物質の移動、エネルギー変化に伴う増分、 q の単位は (J)、 T は(1)式での説明と同じだが、 T の単位は絶対温度。

2) 統計力学的に導びかれたエントロピー公式

$$S = k \ln w \quad (3)$$

S の単位は(2)式と同じで w は系内の原子や分子のエネルギー準位にもとづく基本的微視的配分 (complexion) の数、 k は Boltzmann 定数で $1.38 \times 10^{-23} J/K$

3) 情報理論で扱う情報エントロピー公式

$$I = -\log p \quad (4)$$

I は情報量で、右辺の対数の底が2なら単位はビット (binary digit)、底が e ならナット (natural unit)、10 ならばデシット (decit)、 p は情報の生起確率である。

まず(2)式が最も古くから知られており、エントロピー量を初めて認知した Clausius によるものである。気体の膨脹圧縮という機械の仕事が行われる熱機関の理論から誕生した。系が状態1から状態2に移った時、移動熱量と温度とが (q_1, T_1) から (q_2, T_2) になり、それらの状態量は閉じた系では

$$\frac{q_1}{T_1} + \frac{q_2}{T_2} = 0$$

の関係がある。可逆的なサイクル変化では

$$dS = \oint \frac{SQ}{T} = 0$$

となる。

話が少し飛躍するが、理想溶液中の化学成分 1, 2, …… i のモル分率を $X_1, X_2, \dots, X_i$ とするとき、添加成分 1 モル当りの増加エントロピーは

$$\Delta \bar{S} = -R \sum_i X_i \ln X_i$$

となる。²⁾ R は気体定数であるが、この式形が下に示す離散情報群の総情報量の、1 情報あたりの平均値 H と、定数 R のあるなしだけで同形であることに注目されたい。

(3)式は、(2)式と全く形が違うが、全く同じものである。Boltzmann が初めて導いたので Boltzmann 公式とも呼ばれており、式中の W は系の、考えられる分子配列の数と解してもよい。この公式が(2)式と同じものであることは後に証明する。Boltzmann は統計力学の始祖といわれており、書物に載った彼の記念碑をみると、上 $1/3$ が半身像で下 $2/3$ が石の角柱となっており、その正面に(3)式が刻まれている。

情報量をあらわす(4)式は、情報の生起しうるケースの数を N とすれば、 $I = \log N$ の形になるので、比例定数 k がなければ、(3)式と同様な物理的意味をもつことが理解されよう。情報の価値を、受ける人間の主観的判断に任せず、このように定義して情報理論体系ができたのである。式からわかるように、生起確率の小さい情報ほど情報量としては大、情報エントロピー値が大きいことになる。コインの表か裏かという、二つのケースしかない現象で、どちらかが出たという情報の場合、確率は $1/2$ だから I はビット単位で 1 となる。これに対し、サイコロの一回振りで 1 ~ 6 のどれかの目が出たという情報は、確率が $1/6$ であるから $I = -\log_2(1/6) = 2.58$ ビットとなる。離散 (discrete) 型の情報源から多くの情報が入信した時、その総情報量の平均値を平均情報量と呼び、記号 H を用い

$$H = -\sum_i p_i \log p_i$$

となる。 p_i は i 番目の情報の生起確率である。

生態学でこの平均情報量を多様性指数として用いる³⁾ が、系の中にある i 番目の種 (あるいは属、目……) の生物個体数を n_i 、全生物個体数を N とすると、Shannon-Margalef の多様性指数 (Diversity Index) は次式で示される。

$$DI = -\sum_i \left(\frac{n_i}{N} \right) \log \left(\frac{n_i}{N} \right) \quad (5)$$

ここでエントロピーが資源・エネルギー問題で有する

意義に触れておく。不可逆プロセスでも質量やエネルギーは保存されるのに、エントロピーは保存されず、内部発生エントロピーという余分のものがある。このエントロピー量は結局「放散される役に立たないエネルギー」の大きさに関係している。「役に立つエネルギー」の意味で最近エクセルギー⁴⁾ という指標がとりあげられるが、これもエントロピーと似た熱力学量である。エクセルギー E は、熱機関を例にとると、熱源温度を T 、系の外界温度を T_0 、エンタルピーを H として、 T_0 に対応するエンタルピーを H_0 、エントロピーを S_0 とすれば

$$E = (H - H_0) - T_0 (S - S_0) \quad (6)$$

あるいは、

$$E = \Delta H - T_0 \Delta S$$

と書かれ、仕事可能量とか、有効エネルギーなどの呼び名がある。しかしエクセルギーの不可逆過程の理論は十分でなく、エントロピー理論が進んでいるから、今のところ不可逆過程の理論計算で内部発生エントロピーを算出し、プロセスの違いによるその差を調べることが、省エネルギー技術確立し、あるいは選ぶ上で重要な意味を持っている。

3. 日常的な例にみるエントロピー

以下、いくつか日常的な例を引いてエントロピーの性格を通俗的な意味でとらえ、エントロピーを人為的に上げ下げすることの意義を考える。

1) 会議室や食堂の使用中的状態と使用後

ここでは会議室や食堂の本来の目的と較べてどうかという議論でなく、部屋の秩序という立場での評価である。会議室に人々が入って来て議論し、資料が運ばれ配られ、そして散らかり、灰皿にはタバコの吸殻と灰がたまり、室内空気はよごれ、温度も上昇する。こういう状態の熱力学的エントロピー値を求めてどうこうというのではなく、無秩序性の増大に注目する。食堂の場合も同様で、ダイニングテーブルと椅子があり、まわりに食器棚と流しがあるという整った状態から、料理が始まり、いろんな食品が調理され煮炊きされて、流しと調理場の秩序はいっしょに乱れる。会食が始まれば人々は料理を口にしますが、空きびんやよごれた食器類がテーブルを埋める。

会議室も食堂も、使用後放置すれば無秩序性は増したままだが、人が労力を費して後片付け、掃除をすることにより、器物は再び整頓され、元の秩序を回復し、空気まで清浄になる。長時間たてば自然に元の状態に戻る空気はともかく、労力を費やさないとエントロピーは下がらない。人間以外の存在でこのような秩序を取戻してく

れる力をもつのがMaxwellの魔物である。部屋の秩序というものは、その気になって保つ努力をしない限り、乱れる方向に向かう。

ついでに、会議そのものについても触れよう。会議メンバーが多くなっても、特定の少数者のみが発言し、やりとりする場合はエントロピーは高くならないが、おそらく10人以上のメンバーがいて、それぞれが色々な意見や情報を述べたてれば、情報が多くなるだけでなくそのノイズも多くなり、座長のあたかも混乱することになる。会議の適正規模ということが言われるゆえんである。

2) 都市開発と再開発のちがい

都市計画というものを持たない都市は先ずないが、都市計画があっても乱開発がどんどん進むことは周知の通りである。これは洋の東西を問わない傾向で、通り一辺の条例や規制では仲々思うような姿にはならない。この場合条例や規制は一応秩序の守り手、すなわち反エントロピーそのものののであるが、開発をより望ましいものにするには、結局、よく練られた、実現性がありかつ哲学に裏づけられた再開発という、スクラップアンドビルドが必要であり、都市の近代化はどちらかといえばこの種の反エントロピーで支えられている。

図3は米国サンフランシスコの街区における開発と再開発の違いを対照的に示して⁶⁾いて、誰の眼にも再開発により無秩序さが改良されたことが映ずる。こうした例は、単に秩序といった漠然たる概念で区別するだけでなく、実際に平均情報エントロピー値を求めて比較することができる。そのハードな例を次回に紹介するが、筋道だけ述べると、図3のa), b)図で同じ区画をとり、地表面の建造物の種別を幾通りかに分類し、また建造物のない地表は舗装路面、空地、緑地、水面などに分け、それら工種ごと(1, 2, …… i)の面積占有率を求めて(5)式の n_i/N を計算する。簡単な計算でHが求まる筈で、このようなデータ処理はリモートセンシング情報処理ですで行われている。

3) 心臓・(中)循環器系による血液浄化

a) 再 開 発 前

b) 再 開 発 後

図3 米国都市における再開発前後の比較

人間の血液には多数の白血球と赤血球が、相互のバランスを保ちながら有毒物や老廃物の処理をしている。血清や血球自身、侵入した病菌や毒素と拮抗してそれらを無害な物質に変えたり、抗体を生産して秩序の崩壊病気あるいは死から守っている。つまり血液自身が大きな反エントロピーを提供しているわけであるが、心臓や肺臓、脾臓などもまた別の反エントロピーをもって血液浄化、酸素の補給や有害物質の無害化を行っている。

この機能は汚染空気や汚濁水を浄化再生する処理プロセス・操作に大変似ている。例えば水処理操作がどれだけ汚水のエントロピーを下げ、またその操作過程で内部的に生成するエントロピーがどの位か、といったハードな計算例を後に叙述するが、この人体各臓器の機能も同様な立場で解析、計算ができる筈である。それが医学的にどのような意味をもつか、余り例がなく分らないが、それなりに有意義なことであろう。

4) ゲームの例：

囲碁、麻雀、トランプ、パネルクイズ、囲碁にしろ麻雀にしろ、あるいはトランプ、花札等の各種ゲームは、その大部分がエントロピーを低くするゲームである。

囲碁の場合を図4で示すと(図はスペースの都合で13行13列で示す)、要するに陣地の争奪であるから、a)図のように実力が相近い場合、大変努力をしても白地と黒地の差を大きくすることは難しい。いい方を変えと、対戦者の能力に差がなければ、a)図のごとく両者の目数が極めて近いという結果が確率が高く、生じ易い状態である。図1の気体分子の例と同様に考えればよく、これはエントロピーの高い状態なので、低くしよう、大きく勝とうとすれば、(1)相手よりずっと実力をつけるか、(2)相手の大きなミスや見落としを誘うか待つ(期待するとしておく)、のいずれかである。(1)の場合は当然、初めの置石ハンディがなければ、b)図のようなエントロピーの低い結果の期待確率が大きい。これは図1の初めの状態a)をめざし努力することにあたる。しかし(2)の場合は反対で、その期待確率は低い。このような確率の低い

図4 囲碁の勝負

状態を現出してくれるものは、俗に僥倖といわれるものしかない。

パネルクイズの例をとってみる。これは質問に正解した人が選んだパネルの目を自分の色とし、すでに持っている目と新しく得た目の間の目も自分の目になるというゲームだが、やはり囲碁と同様なことが言え、解答能力の高い人が、図5b)の斜線目の目で示したような、エントロピーの低い結果を得る確率が大きい。しかし、このゲームでは、解答後に選ぶ目の選択とか、他の競技者の目のとりかたといった要素にも支配されるので、囲碁の場合のように、自分の力だけの反エントロピーでは必ずしもよい結果は得られない。

図5 パネルクイズにおけるエントロピー変化

麻雀の役づくり、ブリッジの札揃え、いずれも反エントロピーが多く投入されれば有利である。しかし、牌なりトランプ札は気まぐれで、大いに運が左右する。予じめ4枚ずつトランプ札を配る時でも、4枚がすべてエースということが現実にある。それは確率論上当然のことであるが、「Maxwellの魔物の力」で、人間が仕事をしなくても系のエントロピーが低くなることもある、という論がなされるわけである。

以上、講座の第一回として、まず理解されにくいエントロピーのあらましの性格を述べることに力点を置いた。第二回では本講3.よりもややハードな対象をいくつか紹介し、ついで古典熱力学から化学熱力学の説明に移りたい。

(原稿受理：昭和56年10月2日)

引用文献

- 1) 都筑卓司(1970)：マックスウェルの悪魔（確率から物理学へ）、講談社、41
- 2) Moore, W. J. (1972)：Physical Chemistry, 第4版, 藤代亮一訳(1974), 物理化学(上巻) 245, 東京化学同人
- 3) Margalef, D. R. (1958)：Information Theory in Ecology, General Systems, 3, 36
- 4) 信沢寅男(1980)：エネルギー工学のためのエクセルギー入門, オーム社
- 5) Livingstone, Metalwork (1943-1973)：Encyclopedia Britannica 15th ed., 11, 718~719, Encyclopedia Britannica Inc., および Thewlis, J. (1961)：Encyclopedic Dictionary of Physics, 4, 523, Pergamon Press.
- 6) 彰国社(1974)：都市空間の計画技法, 人・自然・車, 126
- 7) 妹尾学ほか3名(1972)：エントロピー, 共立化学ライブラリー, 共立出版
- 8) Shannon, C. E. & W. Weaver, 長谷川, 井上訳(1977)：コミュニケーションの数学的理論, 明治図書
- 9) Brillouin, L., 佐藤洋訳(1977)：科学と情報理論, みすず書房
- 10) キャレン熱力学上巻(1978)：山本・小田垣訳, 吉岡書店, 同下巻(1978)：同
- 11) Castellan, G. W. (1964)：Physical Chemistry, 目黒ほか2名訳(1970)カステラン物理化学, 東京化学同人
- 12) 合田健, 田井慎吾(1978)：エントロピーによる水質環境評価, 水質汚濁研究, 1, 1, 12~21