APPROXIMATION *VERSUS* IDEALISIERUNG: DAS VERHÄLTNIS ZWISCHEN IDEALEM UND VAN DER WAALSCHEM GASGESETZ

Hans Rott
München

1. Zusammen mit dem idealen Gasgesetz bildet das van der Waalssche Gasgesetz ein Paar, das - neben dem Kepler-Newton-Fall - als vielleicht einfachstes und prägnantestes Musterbeispiel einer *innertheoretischen Approximation* oder einer *intertheoretischen Idealisierung* dienen kann. Intertheoretische Approximation ist ein *quantitativer* Begriff und liegt dann vor, wenn die Gleichungen einer Theorie T_2 beim Übergang gewisser Größen gegen einen Grenzwert Lösungen haben, die bezüglich einer geeigneten Topologie den Lösungen von Gleichungen einer Theorie T_1 beliebig nahe kommen. Alternativ kann man den *qualitativen* Begriff der intertheoretischen Idealisierung dahingehend präzisieren, daß T_1 "vom Standpunkt T_2" als ganz *genau* zutreffend erwiesen werden kann, wenn man T_2 durch geeignete idealisierende, kontrafaktische Annahmen ("Anwendungsbedingungen für T_1") revidiert. Idealisierung ist, um es mit einem Schlagwort zu sagen, *Dekomposition*. Aus der Vielzahl (wechsel-)wirkender Faktoren, die man praktisch nie ganz ausschalten kann, werden sehr wenige, zuweilen nur ein einziger Faktor ausgesondert, um einfache, rechnerisch handhabbare Gleichungen für diese wenigen Faktoren zu erhalten. Es ergibt sich als natürliches Forschungsprogramm die Aufgabe, zu untersuchen, welche zusätzlichen Auswirkungen die zahlreichen anderen, zunächst vernachlässigten Faktoren haben. Quantitative Übereinstimmung mit der Erfahrung spielt dabei zumindest am Anfang überhaupt keine Rolle, da man ja von vornherein weiß, daß noch viele andere Faktoren hinzugerechnet werden müßten. So kann man den Lakatosschen Wissenschaftler verstehen, der sich, wenn er einmal eine positive Heuristik hat, "auf die Couch legt, die Augen schließt und die Daten vergißt" (Lakatos, 1970, S. 135).

Sowohl Approximationen als auch Idealisierungen sind als Explikate für das Bestehen einer *Reduktion* oder *intertheoretischen Erklärung* zwischen Theorien, die sich genaugenommen widersprechen, gedacht. Der althergebrachten deduktiv-nomologischen Schemata eingedenk, richte ich mein Augenmerk vor allem darauf, ob sich das ideale Gasgesetz auf irgendeine Art und Weise aus dem van der Waalsschen Gasgesetz herleiten läßt. In dieser Hinsicht und in diesem Beispiel, so wird sich zeigen, bieten Idealisierungen ein ansprechenderes Bild als Approximationen. (Für allgemeine Argumente zugunsten des Idealisierungs- und zuungunsten des Approximationsbegriffs vgl. Rott, 1988.)

2. Bis zur Mitte des 19. Jahrhunderts wurde das ideale Gasgesetz nicht als Idealisierung aufgefaßt. Nachdem aber Clausius 1857 seine berühmte Arbeit *Über die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen* veröffentlicht hatte, fiel es zumindest den Anhängern der kinetischen Gastheorie wie Schuppen von den Augen. Clausius (1970, S. 170) nannte die folgenden - offenbar als hinreichend und notwendig gedachten - Bedingungen für die Gültigkeit des idealen Gasgesetzes:

> 1. Der Raum, welchen die Moleküle des Gases wirklich ausfüllen, muß gegen den ganzen Raum, welchen das Gas einnimmt, verschwindend klein sein.
> 2. Die Zeit eines Stoßes ... muß gegen die Zeit, welche zwischen zwei Stößen vergeht, verschwindend klein sein.
> 3. Der Einfluß der Molekularkräfte muß verschwindend klein sein.

Für eine strikte Ableitung des idealen Gasgesetzes muß man die "verschwindend kleinen" Grössen *gleich* null setzen. Es ist aber offensichtlich, daß die betreffenden Größen in Wirklichkeit *nicht* gleich null sind. Folglich ist zu erwarten, daß das ideale Gasgesetz einer Korrektur bedarf. Van der Waals ging nun daran, die programmgemäße, sozusagen notwendige und zugleich höchst kreative "De-idealisierung" oder "Konkretisierung" des idealen Gasgesetzes zu vollziehen. Er berücksichtigte zwei Faktoren: die Anziehung zwischen den Teilchen und das Volumen, das sie einnehmen. Dies schlug sich in den zwei stoffspezifischen Korrekturkonstanten a und b für die Zustandsgleichung nieder, welche den Binnendruck (Kohäsionsdruck) und das Kovolumen (Sperrvolumen) repräsentieren.

Während das ideale Gasgesetz nur Aussagen über *Gase im engeren Sinn* (G_e) macht, spricht das van der Waalssche Gasgesetz auch über Dämpfe, Flüssigkeiten und gasförmig-flüssige Zweiphasensysteme, also über "*Gase im weiteren Sinn*" (G_w). Die beiden Gasgesetze sind Gleichungen der Zustandsvariablen Druck, Volumen und Temperatur eines beliebigen Systems (S) eines Gases. Mit den offensichtlichen Abkürzungen und R als "universeller Gaskonstante" können wir sie, bezogen auf ein Mol Gas, so anschreiben:

(IGG) $\forall X\ \forall x\ (G_eX\ \&\ xSX \rightarrow p(x)V(x)=RT(x))$.

(VDW) $\forall X \forall x\ (G_wX\ \&\ xSX \rightarrow (p(x)+(a(X)/V(x)^2))(V(x)-b(X))=RT(x))$.

Ich werde im folgenden davon ausgehen, daß die beiden Gasgesetze keine isolierten Sätze sind, sondern daß sie Minitheorien konstituieren, welche die in (IGG) und (VDW) stillschweigend gemachten Hintergrundannahmen explizit mit enthalten. Folgende Bedingungen werden berücksichtigt:

(1) Zwei der drei Zustandsgrößen sind frei variierbar.
(2) Alle Gase im engeren Sinn sind auch Gase im weiteren Sinn.
(3) Für alle Gase im weiteren Sinn sind die van der Waalsschen Konstanten größer als Null.

Aus der kinetischen Interpretation der Zustandsgleichungen geht hervor, daß (3) ein wesentlicher Bestandteil des van der Waalsschen Gesetzes, aber falsch für das ideale Gasgesetz ist. Wenn im folgenden vom idealen Gasgesetz ("**IGG**") die Rede ist, dann ist eine Theorie gemeint, die (IGG) und (1) als Axiome hat; die als das van der Waalssche Gasgesetz ("**VDW**") bezeichnete Theorie umfaßt (VDW), (1), (2) und (3).

3. Nach der Approximationsidee muß das van der Waalssche Gasgesetz "in das ideale Gasgesetz übergehen", wenn gewisse Größen "gegen einen Grenzwert gehen". *Welche* Grenzwertübergänge sollen aber vollzogen werden? In den Lehrbüchern ist es der üblichste Vorschlag, das Molvolumen gegen unendlich (oder äquivalent die Dichte gegen null) gehen zu lassen. Man läßt aber manchmal auch den Druck gegen null oder die Temperatur gegen unendlich gehen, außerdem werden kombinierte Bedingungen für mehr als eine Zustandsgröße genannt. Ich bleibe der Einfachheit halber aber bei "$V \rightarrow \infty$".

Wir wollen prüfen, ob **IGG** aus **VDW** approximativ ableitbar ist. Zunächst benötigen wir eine Prämisse nach der Art von

(4) $\forall X\ \forall \varepsilon\ \exists \delta_{\varepsilon,x}\ \forall x\ (V(x)>\delta_{\varepsilon,x} \rightarrow \Theta(x,X) \approx_\varepsilon \Phi(x))$,

wobei "$\Theta(x,X)$" das Konsequens von (VDW) und "$\Phi(x)$" das Konsequens von (IGG) ist. Als Präzisierung des Approximationsgedankens bietet sich etwa der folgende Gedanke an. Sei X ein Gas mit den van-der-Waals-Konstanten a(X) und b(X). Dann sei $\Theta(x,X) \approx_\varepsilon \Phi(x)$ definiert durch die Bedingung: Erfüllen die Tripel $\langle p_\Phi, V(x), T(x)\rangle$, $\langle p(x), V_\Phi, T(x)\rangle$ und $\langle p(x), V(x), T_\Phi\rangle$ das Schema $\Phi(x)$ und die Tripel $\langle p_\Theta, V(x), T(x)\rangle$, $\langle p(x), V_\Theta, T(x)\rangle$ und $\langle p(x), V(x), T_\Theta\rangle$ das Schema $\Theta(x,X)$, so ist $|p_\Theta - p_\Phi| < \varepsilon$, $|V_\Theta - V_\Phi| < \varepsilon$ und $|T_\Theta - T_\Phi| < \varepsilon$. Mit dieser Definition ist (4) allerdings, wie man leicht nachrechnet, nicht gültig. Gestehen wir aber einmal zu, daß ein ähnlicher, mathematisch korrekter Satz gefunden werden (und ein Teil von **VDW** sein) kann. Das Ziel ist die sukzessive Ableitung der ε-abhängigen "Annäherungsgesetze"

(IGGε) $\forall X\ \forall x\ (G_e X\ \&\ xSX \rightarrow \Theta(x,X)\ \&\ \Theta(x,X) \approx_\varepsilon \Phi(x))$.

Um ein Gesetz zu erhalten, das ε-nahe am idealen Gasgesetz liegt, braucht man noch eine zusätzliche Voraussetzung, und zwar

(5ε) $\forall X\ \forall x\ (G_e X\ \&\ xSX \rightarrow V(x) > \delta_{\varepsilon,X})$.

Unter Verwendung von (VDW), (2), (4) und (5ε) ist nun (IGGε) ableitbar. Da wir ε beliebig klein vorgeben könne, liegt (IGGε) beliebig nahe an (IGG), und wir haben **IGG** anscheinend tatsächlich approximativ aus **VDW** abgeleitet.

Dies ist jedoch, intuitiv gesehen, ein Trugschluß. Denn mit kleiner werdendem ε wächst δ_ε immer mehr, und es wird äußerst fraglich, ob man (5ε) noch als sinnvoll bzeichnen kann. (5ε) ist weder als definitorische noch als empirische Bedingung für Gase i.e.S. adäquat. Indem wir für die Ableitung von (IGGε) Instanzen des Schemas (5ε) als Prämissen verwenden müssen, spricht (IGGε) nicht allgemein über Gase X i.e.S., sondern nur noch über X-Systeme mit großem Molvolumen. Je kleiner ε wird, über desto weniger Systeme macht (IGGε) noch eine Aussage. Was wir ableiten, sind also nicht approximative Versionen des idealen Gasgesetzes, welches über alle Gassysteme i.e.S. spricht, sondern nur approximative Versionen eines Gesetzes mit zusehends verschwindendem Anwendungsbereich.

Eine Möglichkeit, die immer drastischer werdenden Bereichseinschränkungen durch (5ε) abzufangen, bestünde in einem Grenzübergang der Parameter a und b. Sommerfelds (1952, S. 53) Bemerkung "für a=b=0 oder, was dasselbe ist, für hinreichend großes v geht [die van der Waalssche Gleichung], wie es sein muß, in die ideale Gasgleichung über." ist aber etwas nachlässig und steht in der Literatur allein auf weiter Flur. Da jedes reale Gas X feste, dem Gas eigentümliche Van-der-Waals-Konstanten a(X) und b(X) hat, entfernt sich die Annahme immer kleiner werdender Werte von a und b immer mehr von der Wahrheit, wird - anders gesagt - mehr und mehr kontrafaktisch. Will man keine deflationäre Bereichseinschränkung betreiben, so kommt man um kontrafaktische Prämissen nicht herum. Die Umkehrung gilt jedoch nicht: Wenn man mit kontrafaktischen Annahmen umzugehen vermag, dann kann man auf Approximationsprozesse verzichten.

4. Die van der Waalsschen Konstanten a und b finden in der kinetischen Gastheorie eine theoretische Interpretaion als Maß für den Binnendruck bzw. für das Kovolumen eines "realen" Gases. Keiner der beiden Faktoren wird in **IGG** berücksichtigt. Nach Clausius sagt **IGG**, was der Fall wäre, wenn sich die Gasmoleküle nicht anzögen (und abstießen) und wenn sie ausdehnungslos wären. Entsprechend wird ein Verfechter von **VDW** wohl die folgenden beiden Sätze akzeptieren: "*Wenn* a und b gleich null *wären*, dann *würde* **IGG** gelten; *weil* sie aber *nicht* gleich null sind, deshalb gilt **IGG** *nicht.*"

Man kann sagen, daß **VDW IGG** *als Idealisierung* oder *kontrafaktisch* erklärt, während das, was es *faktisch* erklärt, das Scheitern von **IGG** ist. Gelingt der Nachweis, daß VDW diese doppelte Erklärungsleistung vollbringt, dann kann man **VDW** eine *überlegene Nachfolgertheorie* für IGG nennen. In Rott (1986, 1987) habe ich argumentiert, daß dies auf das folgende *Kriterium* hinausläuft:

VDW ist genau dann eine überlegene Nachfolgertheorie für **IGG**, wenn es (von **VDW** aus gesehen) eine Anwendungsbedingung (I) für **IGG** gibt, so daß gilt: Die minimale Abänderung von **VDW**, die nötig ist, um (I) "wahr zu machen", erlaubt die Ableitung von **IGG**, und die minimale Abänderung von **VDW**, die nötig ist, um **IGG** wahr zu machen, erlaubt die Ableitung von (I).

Die idealisierende Anwendungsbedingung (I) soll intuitiv angemessen und von nicht gesetzesartigem Charakter sein. Im vorliegenden Fall paßt

(I) Für alle Gase im engeren Sinn sind die van der Waalsschen Konstanten gleich null.

(I) steht mit **VDW** offensichtlich im Widerspruch, ist also relativ zu **VDW** eine idealisierende

Anwendungsbedingung. Zu klären ist, *wie* minimale Abänderungen (sogenannte Revisionen) an Theorien vorzunehmen sind. Für den allgemeinen Fall dieses Problems hat Gärdenfors (1988) ein leistungsfähiges Modell entwickelt, für unsere einfache Theorie **VDW** genügt aber die Grundidee, daß man im Zweifelsfalle immer den "theoretisch unwichtigsten" Teil einer Theorie aufgeben soll. Wenn wir davon ausgehen, daß das Axiom (3), so wesentlich es für **VDW** auch sein mag, doch von geringerem Gewicht ist

- als (VDW), die "Identitätskarte" der van der Waalsschen Theorie,
- als (1), die grundlegende Präsupposition aller denkbaren Zustandsgleichungen, und
- als (2), ein quasi analytischer Satz,

dann können wir schlüssig beweisen, daß **VDW IGG** wirklich überlegen ist:

*Von (I) zu **IGG***: (I) widerspricht der Konjunktion von (2) und (3). Da (2) wichtiger als (3) ist, wird in der minimalen Abänderung zur Annahme von (I) (3) aufgegeben. Eine mit (I) kompatible Abschwächung von (3) ist

(3*) Für alle Gase im weiteren Sinn, die keine Gase im engeren Sinn sind, sind die van der Waalsschen Konstanten größer als null.

Da die van der Waalssche Theorie nur minimal abgeändert werden soll, bleibt (3*) erhalten. Die Revision von **VDW** zum Zwecke des Aufnehmens von (I) besteht also aus (VDW), (1), (2), (3*) und (I). Aus dieser Menge ist aber **IGG**, bestehend aus (IGG) und (1), trivial ableitbar.

*Von **IGG** zu (I)*: Wir wollen in **VDW** (IGG) als wahr akzeptieren und das eigentliche van der Waalssche Gesetz (VDW) beibehalten. Dazu betrachten wir die Konjunktion von (IGG) und (VDW). Für ein beliebiges System x eines Gases i.e.S. X ergibt sich aus (IGG), daß $p(x) = RT(x)/V(x)$, was wir wegen (2) in (VDW) einsetzen dürfen. Wir erhalten für alle Gassysteme i.e.S.

(6) $\forall X\, \forall x\, (G_e X \,\&\, xSX \rightarrow (a(X)-RT(x)b(X))V(x)=a(X)b(X))$.

Sei X ein Gas i.e.S. *Angenommen*, (I) gilt nicht, d.h. $a(X)>0$ oder $b(X)>0$. Wegen $V(x)>0$ (Folgerung aus (VDW)) ist $a(X)>0$ und $b(X)=0$ ausgeschlossen. Sei also $b(X)>0$. Im Falle $a(X)=0$ folgt wieder wegen $V(x)>0$ sofort $T(x)=0$ und wegen (IGG) und $V(x)>0$ folgt auch $p(x)=0$, im Widerspruch zu (1). Sei also auch $a(X)>0$. Dann dürfen wir aus (6) und (IGG) schließen, daß gilt:

(7) $\forall X\, \forall x\, (G_e X \,\&\, xSX \rightarrow (V(x)=a(X)b(X)/(a(x)-Rb(X)T(x))\,\&$
$\&\, p(x)=RT(x)/b(X)-(RT(x))^2/a(X)))$

Damit ist aber bei vorgegebener Temperatur sowohl das Volumen als auch der Druck festgelegt. (NB: Die durch (7) charakterisierte Kurve ist, im p,pV-Diagramm eingetragen, als die *Idealkurve* bekannt. Unter der Voraussetzung $R,V(x),a(X),b(X)>0$ impliziert (7), daß $T(x)<a(X)/Rb(X)$, d.h. daß T kleiner als die sogenannte *Boyle-Temperatur* für X sein muß.) Die Festlegung von Volumen und Druck durch die alleinige Angabe der Temperatur steht aber im Widerspruch zu (1). Also gilt (I). QED.

Damit haben wir, unter Zuhilfenahme der wichtigsten Elemente von **VDW**, nämlich (VDW), (1) und (2), aus **IGG** seine Anwendungsbedingung (I) hergeleitet. (I) widerspricht aber der Konjunktion von (2) und (3); da (2) besser verankert ist als (3), muß (3) in der minimalen Abänderung zur Aufnahme von (IGG) aufgegeben werden. Wir können (3) wieder durch (3*) oder auch durch

(3**) Für alle Gase im weiteren Sinn sind die van der Waalsschen Konstanten größer oder gleich Null

ersetzen. Die Revision von **VDW** zum Zwecke der Assimilation von **IGG** besteht dann aus (VDW), (1), (2), (3**) und (IGG). Aus dieser Menge folgt, wie wir sahen, (I).

Damit haben wir gemäß dem oben angeführten Kriterium gezeigt, daß **VDW** in der Tat eine überlegene Nachfolgertheorie für **IGG** ist. **VDW** erklärt faktisch das Scheitern von **IGG** und kontrafaktisch **IGG** selbst (oder die "theoretische Signifikanz" von **IGG**). Schließlich findet die idealisierende Anwendungsbedingung (I) für **IGG** durch die kinetische Theorie der Materie eine

Interpretation, die genau das wiedergibt, was man intuitiv erwartet: *Wenn* die Gasmoleküle Massenpunkte (nicht räumlich ausgedehnt und nicht wechselwirkend) *wären, dann würde* das ideale Gasgesetz gelten.

LITERATUR

Clausius, R., "Über die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen", in: *Kinetische Theorie I*, hg. Brush, S. G. (Braunschweig, 1970).

Gärdenfors, P., *Knowledge in Flux* (Cambridge/London, 1988).

Lakatos, I., "Falsification and the Methodology of Scienctific Research Programmes", in: *Criticism and the Growth of Knowledge*, hg. Lakatos, I./Musgrave, A. (Cambridge etc., 1970).

Rott, H. "Ifs, Though, and Because", *Erkenntnis* 25 (1986).

_____, "On Relations Between Successive Theories", in: *Abstracts 8th LMPS*, Bd. 4/2 (Moskau, 1987).

_____, "Approximation Versus Idealization: The Kepler-Newton Case", in: *Idealization-II: Forms and Applications*, hg. Brzezinski, J./Coniglione, F./Kuipers, T./Nowak, L. (Amsterdam, 1989).

Sommerfeld, A., *Vorlesungen über theoretische Physik*, Bd. V, *Thermodynamik und Statistik* (Wiesbaden, 1952).

* * *