

az eredeti rendszer konzervativitását. Az egyes egyenletrendszerek egyenleteit a konzervativitást definiáló összes egyenletből az összes lehetséges módon úgy kell kiválasztanunk, hogy minden egyenlet legalább egy rendszerben előforduljon, és hogy mindegyik rendszer pontosan  $M$  számú egyenletet tartalmazzon. Ez utóbbi teljesüléséhez az  $e_m = 0$  esetben az  $x_m = x_m$  egyenletet is a rendszerhez kell csatolnunk.

Az elsőrendű mechanizmus általános esetére tehát egyszerű szükséges és elégséges feltétel helyett egy *eljárást* tudunk megadni, amely  $e$  számú lineáris egyenletrendszer együtthatómátrixának a megvizsgálásából áll. Egy egyszerű szükséges és elégséges feltétel, amilyen a fenti 3.4. tételben szerepel, algoritmikusan szintén valamilyen eljárással ellenőrizhető csak (gondoljunk a szénhidrogének pirolízisének előforduló többszáz elemi reakcióra), viszont egy ilyenél az is előfordulhat, hogy a feltételek kémiai nyelven megfogalmazhatók ((3.3) és (3.4) azt jelenti, hogy  $J$  számú kémiai komponens egymásba alakul át, a többiekből pedig csak kisebb indexűek keletkezhetnek), s ekkor esetleg kémiai megfontolások alapján eldönthető, hogy teljesülnek-e, vagy sem.

A következő tétel az előzőhöz hasonló módszerrel közvetlenül is bebizonyítható, de az előző tételből is következik, ha  $\beta$   $m$ -edik sorát végigosztjuk az  $\alpha(m, m)$  számmal és figyelembe vesszük a 2.1. megjegyzés (i) részét.

**3.5. TÉTEL.** *Tegyük fel, hogy egy olyan mechanizmusban, amelyben minden reaktáns komplex tartója egy elemű,  $M = R$ , és az elemi reakciók úgy vannak számozva, hogy  $\alpha$   $M \times M$ -es diagonális mátrix. Ezen feltételek mellett a mechanizmus pontosan akkor konzervatív, ha  $\beta$  a kémiai komponensek alkalmas permutálása után az alábbi módon bontható fel:*

$$\beta = \begin{pmatrix} P & A \\ 0 & B \end{pmatrix},$$

ahol

- a  $\beta$  mátrix minden oszlopában van zérustól különböző elem,
- a  $P$   $J \times J$ -s mátrix (ahol  $J$  egy 2 és  $M$  közé eső természetes szám), minden sorában és minden oszlopában pontosan egy nullától különböző elem áll, s ezek az elemek éppen az  $\alpha$  mátrix megfelelő sorban álló elemei,
- $0$  zérusmátrix,
- $A$  és  $B$  pedig olyan, mint a 3.4. tételben.

A jelen szakasz kémiai szempontból legáltalánosabb elégséges feltétele következik, amely matematikai szempontból trivialis: Ha egy mechanizmus a következő szerkezetű elemi reakciókból áll:

$$(3.5) \quad \eta(m)\mathcal{X}(m) === \sum_{k=1}^{m-1} \eta^{M+m}(k)\mathcal{X}(k), \quad m = J+1, \dots, M;$$

ahol a  $===$  jel mindkét irányú nyilat jelenthet, vagy akár mindkettőt egyszerre, és az  $\eta(m)\mathcal{X}(m)$  ( $m = 1, 2, \dots, J$ ) komplexek tetszőleges módon vannak egymással elemi reakciókat jelképező nyilakkal összekötve, akkor a mechanizmus konzervatív.