

0. Bevezetés

Dolgozatunk kettős céllal íródott. Egyrészt egységes keretben, bizonyításokkal és példákkal együtt összefoglaljuk az irodalomban fellelhető olyan eredményeket, amelyek az anyagmegmaradásra vonatkoznak, és kémiai reakciókinetikai indíttatásúak. Másrészt megadunk néhány olyan feltételt, illetve algoritmust, amelyek az ismertekkel szemben bizonyos előnyökkel rendelkeznek.

Hogyan alkalmazhatók az itt előadott állítások? Ha a vizsgált mechanizmus közvetlenül egy jól kézbentartott kísérlet leírására szolgál, akkor valószínűleg atomos szerkezetű kémiai komponenseket tartalmaz, és teljesíti az atomszámmegmaradás törvényét, tehát konzervatív. Ha viszont (és elsősorban erre a szituációra gondoltunk) valaki konstruál egy mechanizmust, mert úgy gondolja, hogy az érdekes tulajdonságokkal rendelkezik (így született többek között a Brüsszelátor, a Schlögl-modell vagy az Ivanova-modell), akkor felvetődik az a kérdés, hogy a modell mennyire reális abban az értelemben, hogy a tömegmegmaradás alapvető követelményének eleget tesz-e. Erre a kérdésre, s az általa indukált rokon problémákra igyekeztünk ebben a dolgozatban válaszolni. Kiemeljük, hogy a szubkonzervativitásnak messzemenő *dinamikai* következményei vannak [10] a reakciók *determinisztikus* modelljére nézve, tehát igen hasznos, ha rendelkezünk erre vonatkozó feltételekkel. A kémiai reakciók szokásos *sztochasztikus* modelljében pedig a *stacionárius* eloszlásra vonatkozó állításokat lehet megfogalmazni az itt kifejtett állításokból kiindulva.

A cikk felépítése a következő: először ismertetjük a formális reakciókinetikából felhasználandó *alapgfogalmakat*. Kiemeljük, hogy ezen fogalmak közül újak azok, amelyek a 2.2. definícióban jelennek meg. Ezután áttérünk az *eredmények* ismertetésére, ahol a tételek inkább logikai, mint történeti sorrendben követik egymást. Ismert tételek esetén mindenütt megadjuk az eredeti lelőhely pontos adatait. A Kitekintésben rámutatunk arra, hogy az itteni eredmények hogyan kapcsolódnak konkrét modellekre (elsősorban a szokásos sztochasztikus modellre) vonatkozó vizsgálatokhoz. Megemlítünk néhány nyílt problémát is. A Függelékben segédeszközként használt tételeket ismertetünk.

A további kapcsolatok iránt érdeklődő Olvasónak az [1,7,8] írásokat ajánljuk szíves figyelmébe.

A félreértések elkerülése végett megadjuk azon jelölések jegyzékét, amelyek talán nem szerepelnek mindenütt teljesen egységesen.