3.5. Az atomszám-megmaradás törvénye

A következőkben megfogalmazzuk azt a matematikailag triviális, kémiailag alapvető állítást, amely szerint, ha az atomok a reakciókban megmaradnak, akkor a tömeg is megmarad.

3.6. TÉTEL. *Ha egy atomos szerkezetű kémiai komponenseket tartalmazó mechanizmus teljesíti az atomszám-megmaradás törvényét, akkor az konzervatív.*

Bizonyítás. Legyen $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \mathcal{D}, \alpha, \beta, \delta \rangle$ egy atomos szerkezetű kémiai komponenseket tartalmazó mechanizmus. Ha ez a mechanizmus teljesíti az atomszám-megmaradás törvényét, akkor $\delta\gamma = \mathbf{0}$ $(\in \mathbb{R}^{D\times R})$. Legyen $\rho^\top := 1^\top\delta$, ahol $1 \in \mathbb{R}^D$ a csupa egyesekből álló vektor. Az így definiált ρ vektor nyilvánvalóan teljesíti a konzervativitás definíciójában kirótt mindkét feltételt. □

Amint azt a 2.3. példa is mutatja, a tétel megfordítása nem igaz.

A továbbiakban atomos szerkezetű mechanizmusokkal nem foglalkozunk, lásd ezekről például ARIS, BOWEN, HOLDERITH, PETHŐ, SCHAY és mások [1]-ben felsorolt műveit.

3.6. Kiegészítések

Kimondunk egy általános állítást a reverzibilitás és a 2.2. és 2.3. definícióban szereplő fogalmak viszonyáról.

3.7. TÉTEL. *Ha egy mechanizmus reverzibilis, akkor nem szigorúan szuper-, nem szuper-, nem szub- és nem szigorúan szubkonzervatív; továbbá nem szigorúan tömegtermelő és nem szigorúan tömegfogyasztó.*

Bizonyítás. 1. Az első négy állítás közül nyilván elegendő megmutatnunk, hogy egy reverzibilis mechanizmus nem lehet szuperkonzervatív; a többi állítás elemi logigai műveletekkel, illetve a 2.1. megjegyzés figyelembevételével adódik.

Ha a mechanizmus reverzibilis, akkor minden $r \in \mathcal{R}$ esetén létezik olyan $r' \in \mathcal{R}$, amellyel $\gamma(\,.\,, r) = -\gamma(\,.\,, r')$. Ennélfogva, ha $\rho^\top\gamma(\,.\,, r) > \mathbf{0}^\top$, akkor $\rho^\top\gamma(\,.\,, r') < \mathbf{0}^\top$; Vagyis semmilyen tömegvektorral nem lehetnek az elemi reakciókra vonatkozó tömegmérlegek azonos irányúak.

2. A fentiekhez teljesen hasonlóan lehet megmutatni, hogy egy reverzibilis mechanizmus nem lehet szigorúan tömegtermelő sem, mert — amint azt a 4.1. tételben látni fogjuk — akkor szigorúan szuperkonzervatív lenne. □

Most megadunk egy *algoritmust,* amely eredményesen használható a konzervativitás vizsgálatára.

Tekintsük a következő *lineáris programozási* feladatot. A

$$\rho^\top\gamma = \mathbf{0}^\top, \quad \rho^\top 1 = 1, \quad y1 \le \rho \quad \rho \ge \mathbf{0}$$

feltételek mellett maximalizálandó az $f(\rho, y) := y$ célfüggvény, ahol ρ $\mathbb{R}^M$-beli vektor-, y pedig skalárváltozó.