Reverzibilis Reaction System

2019. október 17.

Definíció. Legyen $\mathcal{A} = (S, A)$ egy *reaction system* és π egy $\mathcal{A}$ felett adott π *interactive process*, amelynek állapotait $sts(\pi) = W_0, W_1, \dots W_n$ módon jelöljük. π reverzibilis, amennyiben minden W_i $(1 \leq i \leq n)$ állapotára teljesül, hogy $\nexists\, W \in \mathcal{P}(S) : res_{\mathcal{A}}(W) = W_i \ \wedge W \neq W_{i-1}$.

Definíció. Legyen $\mathcal{A} = (S, A)$ egy *reaction system*. $\mathcal{A}$ reverzibilis, ha bármely felette definiált π *interactive process* reverzibilis.

Tétel. *Az $\mathcal{A} = (S, A)$ reaction system reverzibilis, amennyiben teljesülnek a következő feltételek:*

(1) Egyértelmű, hogy egy állapot mely reakciók alkalmazásával állt elő. Azaz, tetszőleges $a = (R_a, I_a, P_a), b = (R_b, I_b, P_b) \in A$ $(a \neq b)$ reakciópár esetén a következők egyike teljesül:

- *a és b azonos feltételek mellett alkalmazhatók, tehát $R_a = R_b$ és $I_a = I_b$.*
- *a és b produktumai nem átfedők, azaz $P_a \cap P_b = \varnothing$.*
- *a produktuma tartalmazza b produktumát is, azonban a és b nem alkalmazhatók egyszerre, tehát $P_b \subset P_a$ és $R_a \cap I_b \neq \varnothing$ vagy $R_b \cap I_a \neq \varnothing$.*
- *a és b produktumai megegyezők, azonban van olyan $c = (R_c, I_c, P_c) \in A$ szabály, mely a-val együtt mindig, b-vel együtt azonban sosem alkalmazható. Ekkor $R_c \subseteq R_a$ és $I_c = I_a$, továbbá $R_c \cap I_b \neq \varnothing$.*

(2) A kontextusból kapott szimbólumok nem állhatnak elő egy reakció produktumaként sem: ha $\pi = (\gamma, \delta)$ egy interactive process, ahol $\gamma = C_0, C_1, \dots, C_n$, $n \geq 1$, akkor bármely C_i kontextus és $a \in A$ reakció esetén $C_i \cap P_a = \varnothing$.

(3) Az állapotok minden eleme részt vesz valamilyen reakcióban: ha π *egy interactive process, ahol* $sts(\pi) = W_0, W_1, \ldots, W_n$, $n \geq 1$, *akkor* $\bigcup_{a \in en(W_i)} R_a = W_i$, $i \leq n$.

Definíció. A reverzibilitás szimulálása.