

Az r -edik elemi reakció bal és jobb oldalán szereplő formális lineáris kombinációkat (amelyek maguk tehát közvetlenül *nem* elemei egy lineáris térnek, bár megfeleltethetők nekik ilyen elemek) (*reaktáns*, illetve *termék*) *komplexez*nek nevezik, a megfelelő $\alpha(\cdot, r)$ és $\beta(\cdot, r)$ vektorokat pedig (*reaktáns*, illetve *termék*) *komplex vektoroknak*. Ha egy komplex vektor a nulla vektor, akkor a megfelelő komplexeket *üres kompleznek* nevezzük, ennek jele: \emptyset . A komplexeket és a nekik megfelelő komplex vektorokat a továbbiakban azonosítjuk. Ezzel az egyszerűsítéssel élve azt mondjuk, hogy egy η komplex *hossza* (ahol η az $\alpha(\cdot, r)$ és $\beta(\cdot, r)$ vektorok valamelyike:

$\eta \in \{\alpha(\cdot, r); r \in \mathcal{R}\} \cup \{\beta(\cdot, r); r \in \mathcal{R}\}$) koordinátáinak összege: $\ell(\eta) := \sum_{m=1}^M \eta(m)$;

egy komplex *tartója* azon kémiai komponensek indexének halmaza, amelyek az adott komplexben nullától különböző együtthatóval szerepelnek:

$$\text{supp } \eta := \{m \in \mathcal{M}; \quad \eta(m) \in \mathbb{N}\}.$$

2.1. Megjegyzés. Az α és β mátrix elemeit kémiai jelentésük miatt célszerű egészeknek venni. (Valójában sztöchiometriai számításoknál gyakran alkalmaznak törtekkel megadott reakciókat, és ilyenekre vonatkozó sebességi állandókat.) Ezt a dolgot *állításaiban* általában nem fogjuk lényegesen kihasználni, de egyes *bizonyításokat* valós elemek esetére kissé módosítani kellene.

A kémiai reakció *időbeli lejtársódásának* modelljeiről — azaz a szűkebb értelemben vett reakciókinetikáról — ebben a dolgozatban direkt módon nem esik szó, lásd erről például az [1] vagy a [8] összefoglalót. Amiről itt szó van, az az összes kinetikai modell kerete. Az ilyenfajta vizsgálódások a *sztöchiometria* néven emlegetett területre esnek. A sztöchiometria és kinetika viszonya a mechanikai *kinematika* és *dinamika* viszonyára emlékeztet, amennyiben ott is az előbbi szolgáltatja a keretet az utóbbi leírásához. Még pontosabban: a sztöchiometria foglalkozik a mérleg-egyenletnek, míg a reakciókinetika a transzportegyenletnek megfelelően specializált alakjával.

Dolgozatunk célja az anyag megmaradásának, termelődésének, illetve fogyasztásának vizsgálata. Teljes anyagmérleg készítése esetén a termelődésnek, illetve fogyasztásnak nyilvánvalóan nem lenne értelme; ezek a modellezés közben alkalmazott, de ott igen hasznos fogalmak. Azonkívül azonban, hogy a szokásosan vizsgált formális reakciók nagy részénél (Lotka–Volterra-modell, Oregonátor, explodátor, Brüsszelátor, Schlögl-modell stb.; ezen modellek definíciója és kémiai háttere az eredeti hivatkozásokkal együtt megtalálható például [1]-ben) az anyag formálisan nem marad meg, érdemes még arra is gondolni, hogy az anyag egy része a vizsgált rendszerből távozhat (például az edény falára), illetve a külvilágból (például az edény faláról) jöhet is be rendszerbe. Másik, igen gyakori ok ilyen „furcsa” modellek létrejöttére az lehet, hogy bizonyos specieszek nagy mennyiségben vannak jelen, s ezek változásától eltekintünk. Lehet, hogy például a *tömegelnyelő* és *-kibocsátó* elnevezés kevésbé lenne fűlsértő az ilyen helyzetek megnevezésére.

Az anyagmegmaradást, -termelődést vagy -fogyást két különböző oldalról közelíthetjük meg. Az első esetben a mechanizmus különböző kémiai komponenseit