

Ha α és β elemei nemcsak egész számok lehetnek, akkor ez a bizonyítás kissé módosítandó.

3.4. A rekeszrendszerek különféle általánosításai

3.3. TÉTEL. Egy általánosított rekeszrendszer pontosan akkor konzervatív, ha zárt.

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy a vizsgált általánosított rekeszrendszer zárt. Ekkor csak (2.12) alakú elemi reakciók fordulhatnak elő benne. Legyen $\rho := (1/\eta^1, \dots, 1/\eta^M)^\top$. Ez a definíció értelmes az általánosított rekeszrendszer definíciójában szereplő (i) feltétel miatt. Az így definiált ρ vektornak nyilván minden koordinátája pozitív, és ha az elemi reakciók közül m -ediknek éppen azt nevezzük, amelyiknek a reaktáns komplexében $X(m)$ szerepel, akkor $\rho^\top \beta = \rho^\top \alpha = 1 \quad (\in \mathbb{R}^R)$, ρ tehát teljesíti a konzervativitás definíciójában szereplő mindkét feltételt.

Ha viszont az általánosított rekeszrendszer nem zárt, akkor van egy olyan elemi reakció (legyen ez az r -edik), amelyekre $\gamma(\cdot, r) = \eta e_p$ valamelyik e_p bázisvektorral és egy nullától különböző η számmal. Ekkor viszont a $\rho^\top \gamma = 0^\top$ egyenletrendszer r -edik egyenlete miatt $\rho_p = 0$ lenne, ellentétben a konzervativitás definíciójával. \square

3.4. TÉTEL. Tegyük fel, hogy egy elsőrendű mechanizmusban $M = R$ és $\alpha = I_M$. Ezen feltételek mellett a mechanizmus pontosan akkor konzervatív, ha β a kémiai komponensek alkalmas permutálása után az alábbi módon bontható fel:

$$(3.1) \quad \beta = \begin{pmatrix} P & A \\ 0 & B \end{pmatrix},$$

ahol

- a β mátrix minden oszlopában van zérustól különböző elem,
- P $J \times J$ -s permutáció mátrix (ahol J egy 2 és M közé eső $[2 \leq J \leq M]$ természetes szám),
- 0 zérusmátrix,
- B azon elemei, amelyek nincsenek a főátló fölött, zérusok, egyébként pedig
- A elemei és B többi eleme tetszőleges.

Bizonyítás. A konzervativitás esetünkben azt jelenti, hogy a

$$(3.2) \quad \rho^\top = \rho^\top \beta$$

egyenletrendszernek létezik $\rho \in (\mathbb{R}^+)^M$ megoldása.

1. Egyik irányban tegyük fel, hogy β (3.1) alakú. Ekkor ρ első J koordinátáját 1-nek választva a többi koordináta egymás után kifejezhető a $J+1$ -edik, ..., M -edik egyenletből. Az így meghatározott ρ vektor K -adik koordinátája (ahol K egy $J+1$ és M közötti $[J+1 \leq K \leq M]$ egész szám) a $\rho_1, \dots, \rho_{K-1}$ pozitív számok olyan nemnegatív együtthatós lineáris kombinációja, ahol az együtthatók