Gyakran szükségünk lesz a $\gamma := \beta - \alpha$ mátrixra. Az összetett kémiai mechanizmus definíciója pontosan azt követeli meg γ-tól, hogy ne legyen sem zérus oszlopa, sem zérus sora, elemei egészek legyenek, és ne legyenek azonos oszlopai.

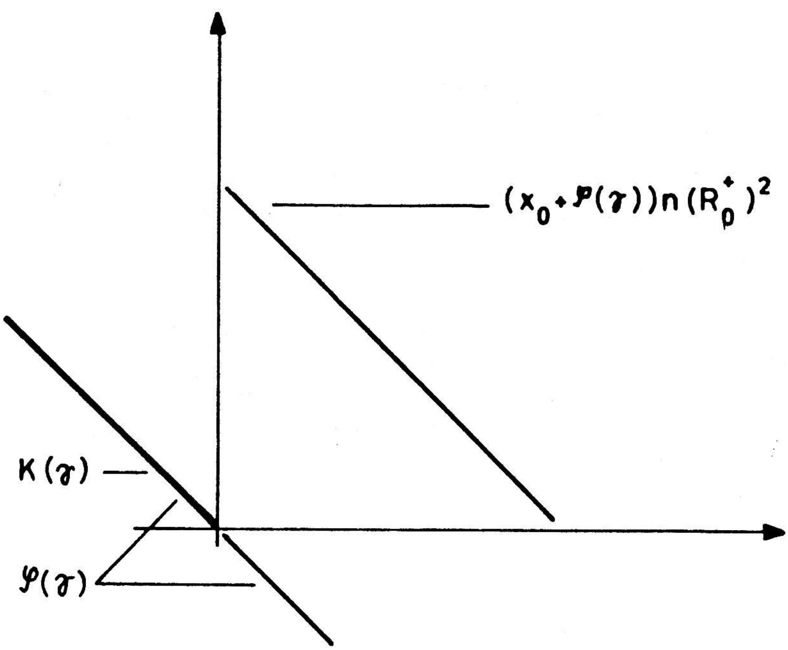
A γ mátrix $\gamma(.,r)$ oszlopai által generált lineáris teret *sztöchiometriai térnek* nevezzük, és $\mathcal{S}(\gamma)$-val jelöljük. Tetszőleges $\mathbf{x}_0 \in (\mathbb{R}_0^+)^M \setminus \{\mathbf{0}\}$ pont esetén az $(\mathbf{x}_0 + \mathcal{S}(\gamma)) \cap (\mathbb{R}_0^+)^M$ halmaz neve: az $\mathbf{x}_0$-hoz tartozó reakciószimplex.

Használni fogjuk majd a γ mátrix oszlopai által generált *kúpot* (azaz az oszlopvektorok nemnegatív lineáris kombnációinak halmazát) is:

$$\mathcal{K}(\gamma) := \left\{ \sum_{r \in \mathcal{R}} \lambda_r \gamma(.,r); \quad \forall r \in \mathcal{R}\ \lambda_r \in \mathbb{R}_0^+ \right\}.$$

Megjegyezzük, hogy $\mathcal{K}(\gamma)$ sohasem csak a $\mathbf{0}$ vektorból áll a 2.1. definíció (ii) (a) része miatt.

A reakciószimplex és a fenti kúp itteni vizsgátainkban fontos szerepet fog játszani, konkrét dinamikai modellek esetén pedig (amilyeneket itt nem tárgyalunk) a trajektóriák menetéről adnak felvilágosítást.



1. ábra. Reakciószimplex és $\mathcal{K}(\gamma)$ az $\mathcal{X} \to 2\mathcal{Y}$ mechanizmusnál