

A fenti definícióban megfogalmazott viszonyt a komplex mintájára ismét formális lineáris kombinációval lehet kifejezni:

$$(2.11) \quad \mathcal{X}(m) = \sum_{d=1}^D \delta(d, m) \mathcal{A}(d) \quad (m \in \mathcal{M}).$$

A kémiában azonban ezt a kapcsolatot inkább indexekkel szokás kifejezni. Ha például $M := 1$, $\mathcal{X}(1) := H_2O$, akkor $D := 2$, $\delta(1, 1) := 2$, $\delta(2, 1) := 1$, és $\mathcal{A}(1) := H$, $\mathcal{A}(2) := O$; akkor a fenti formális lineáris kombináció így festene; $H_2O = 2H + O$; szokásosan azonban a δ mátrix (egyedtől különböző) elemei indexekként jelennek meg.

A fent definiált absztrakt atom az alkalmazásokban lehet például elektron, ion vagy gyök is. Továbbmenve: tetszőleges mechanizmus tekinthető atomos szerkezetű specieszeket tartalmazó mechanizmusnak, ha atomoknak a specieszeket tekintjük, és δ -t az egységmátrixnak vesszük.

A 2.3. példában szereplő első mechanizmust azért neveztük irreálisnak, mert a specieszek atomos szerkezetűek, de az egyes atomok száma az elemi reakcióban megváltozik. Az ilyen átalakulások nem tartoznak a szűkebben vett kémiai vizsgálatok körébe; az itt vizsgálandó elemi reakciókban az atomok száma változatlan. Ennek a tulajdonságnak a formális definíciója következik most.

2.5. Definíció. Legyen $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \mathcal{D}, \alpha, \beta, \delta \rangle$ egy atomos szerkezetű kémiai komponenseket tartalmazó mechanizmus. Azt mondjuk, hogy ez a mechanizmus *teljesíti az atomszám-megmaradás törvényét*, ha $\delta\gamma = 0$ ($\in (\mathbb{N}_0)^{D \times R}$).

2.3. Rekeszrendszerek és elsőrendű mechanizmusok

További speciális (nem feltétlenül atomos szerkezetű) mechanizmusokat definiálunk.

2.6. Definíció. Az $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \alpha, \beta \rangle$ mechanizmus *rekeszrendszer* (vagy *kompartment-rendszer*), ha minden $r \in \mathcal{R}$ esetén

$$\sum_{m=1}^M \alpha(m, r) \leq 1 \quad \text{és} \quad \sum_{m=1}^M \beta(m, r) \leq 1.$$

Egy rekeszrendszer *zárt*, ha mindkét helyen egyenlőség áll (vagy, ami ezzel ekvivalens: az α és β mátrix minden oszlopa különbözik a nulla vektortól).

2.7. Definíció. Azt mondjuk, hogy az $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \alpha, \beta \rangle$ mechanizmus *általánosított rekeszrendszer* [6], ha

(i) az $[\alpha \ \beta]$ mátrix minden sorában minden nullától különböző elem értéke azonos, és

(ii) α és β minden oszlopában legfeljebb egy nullától különböző elem áll.

Egy általánosított rekeszrendszer *zárt*, ha az α és β mátrix minden oszlopa különbözik a nulla vektortól.