2.9. Definíció. [10] Az $\langle \mathcal{M}, \mathcal{R}, \alpha, \beta \rangle$ mechanizmus (redukált) *Volpert-gráfja* az az irányított páros gráf, amelynek csúcshalmaza az $\mathcal{M} \cup \mathcal{R}$ halmaz, és amelynek $\mathcal{X}(m) \in \mathcal{M}$ csúcsából $r \in \mathcal{R}$ csúcsába halad egy él, ha $\alpha(m, r) > 0$, és $r \in \mathcal{R}$ csúcsából $\mathcal{X}(m) \in \mathcal{M}$ csúcsába pedig akkor halad él, ha $\beta(m, r) > 0$. A gráfnak $\mathcal{M}$-en belül és $\mathcal{R}$-en belül haladó éle nincs. Egy Volpert-gráfban azon kémiai komponensek $\mathcal{M}_0 \subset \mathcal{M}$ halmazát, amelyekbe nem fut be él, a *gráf kezdőpontjai* halmazának nevezzük.

2.9. Megjegyzések. (i) Ebben a definícióban lényeges, hogy $\mathcal{M}$ és $\mathcal{R}$ diszjunkt, itt tehát $\mathcal{M}$ elemeit nem azonosíthatjuk az első M természetes számmal.

(ii) Aciklikus gráfban minden út kezdőpontja különbözik a végpontjától, ezért nincs benne önmagát metsző út, azaz olyan út, amely valamely ponton legalább kétszer megy át; a gráf végessége következtében léteznek olyan csúcspontok, amelyekbe nem megy be él. Ha egy Volpert-gráf esetén feltesszük, hogy a reaktáns komplex vektorok között a nulla vektor nem szerepel, akkor az ilyen csúcspontok csak kémiai komponenseknek (és nem elemi reakcióknak) megfelelő csúcspontok lehetnek, mivel a feltétel azt jelenti, hogy minden elemi reakciót jelképező csúcsba megy be legalább egy kémiai komponensnek megfelelő csúcsból induló él.

3. A definiált tulajdonságok fennállására vonatkozó szükséges, elégséges, valamint szükséges és elégséges feltételek

3.1. A 2.2. definícióban szereplő fogalmakra vonatkozó feltételek

3.1. Megjegyzés. A 2.2. definícióban szereplő feltételek rendre ekvivalensek a következőkkel:

(i) $\gamma \vdash \mathbf{0}$;

(ii) $\forall \mathbf{x}_0 \in (\mathbb{R}_0^+)^M (\mathbf{x}_0 + \mathcal{K}(\gamma)) \cap (\mathbb{R}_0^+)^M$ nem korlátos;

(iii) $\forall \mathbf{x}_0 \in (\mathbb{R}_0^+)^M (\mathbf{x}_0 - \mathcal{K}(\gamma)) \cap (\mathbb{R}_0^+)^M$ nem korlátos;

(iv) $\gamma \dashv \mathbf{0}$;

(v) $\forall \mathbf{x}_0 \in (\mathbb{R}_0^+)^M (\mathbf{x}_0 \pm \mathcal{K}(\gamma)) \cap (\mathbb{R}_0^+)^M$ korlátos.

(ii)-ben, (iii)-ban és (v)-ben elég azt tudni, hogy van olyan $\mathbf{x}_0 \in (\mathbb{R}_0^+)^M$, amelyre a feltétel teljesül.

3.2. Konzervativitásra vonatkozó szükséges és elégséges feltételek

A feltételeket általánosságuk csökkenő sorrendjében adjuk meg.

A sztöchiometriai alteret és a reakciószimplexet felhasználhatjuk a konzervativitás jellemzésére.

3.2. Megjegyzés. Egy mechanizmus akkor és csak akkor konzervatív, ha $\mathcal{S}(\gamma)^{\perp} \cap (\mathbb{R}^+)^M \neq \emptyset$, mivel a konzervatív mechanizmus definíciója egy olyan ρ vektor létezését írja elő, amely mindkét halmaznak eleme.