

设某问题允许讨论的所有热历史函数 $T: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{D}, \mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}$ 构成一个函数空间 \mathcal{T} , 且对给定的每一个 $T \in \mathcal{T}$, 我们都定义一个不同的函数 $b: \mathbb{U} \rightarrow \mathbb{I}$, 其中

$$\mathbb{I} \subseteq \mathbb{R}, \mathbb{U} = \{(x, y) | y \in \mathbb{R} \text{ 且 } x = T(x)\} \subset \mathbb{D} \times \mathbb{R}$$

所有 $T \in \mathcal{T}$ 对应的函数 b 构成的函数空间为 \mathcal{B}' , 那么我们就建立了一个由 \mathcal{T} 到 \mathcal{B}' 的映射, 记为泛函 $\mathcal{F}: \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{B}'$ 。同时, 由 $\beta(t) = b(T(t), t) \forall t$, 也定义了一个函数 $\beta: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{I}$ 。所有 $T \in \mathcal{T}$ 对应的函数 β 构成的函数空间为 \mathcal{B} , 通过 β 和 T 我们也确立了 \mathcal{B}' 与 \mathcal{B} 之间的双射, 并记由 \mathcal{T} 到 \mathcal{B} 的映射为泛函 $\mathcal{F}: \mathcal{T} \rightarrow \mathcal{B}$ 。

给定任意连续闭集 $[0, t] \subseteq \mathbb{R}$, 在此域上的定积分 $\int_0^t \beta(t') dt'$ 在给定 $T \in \mathcal{T}$ 和初值 α_0 下唯一确立了一个函数 $\alpha: \mathbb{R} \times \mathbb{J} \rightarrow \mathbb{J}, \mathbb{J} \subset \mathbb{R}$,

$$\alpha(t, \alpha_0) = \int_0^t \beta(t') dt' + \alpha_0$$

给定任一对 $a_0, a^* \in \mathbb{J}$, 则记 $\alpha(t, a_0) = a^*$ 的解为 $t_i^*, i = 1, \dots, m$, m 未必等于 1。又令 $\beta_i^* = \beta(t_i^*)$ 。

设 \mathcal{T} 中所有 T 的值域的并集为 $\mathbb{D}_{\mathcal{T}}$ 。等转化率假设: 化学反应式的泛函 \mathcal{F} 具有以下性质: 存在一个函数 $M: \mathbb{D}_{\mathcal{T}} \rightarrow \mathbb{I}$ 使得对任意 $T \in \mathcal{T}$ 和 $a_0, a^* \in \mathbb{J}$ 均有 $\beta_i^* = M(T_i)$ 。

基于上述数学设定和等转化率假设, 若进行 n 次实验, 在第 j 次实验中, 起始 ($t = 0$) 反应程度为 $a_{0,j}$, 采用变温程序 $T_j(t)$, 观测到的转化曲线为 $\alpha_j(t, a_{0,j}), j = 1, \dots, n$ 。从这 n 条转化曲线中, 我们可以留意到, 在 t_{ij} 时刻, $i = 1, \dots, m_j$, 转化率为 a^* , 即

$$t_{ij} = t |_{\alpha_j(t)=a^*}, j = 1, \dots, n, i = 1, \dots, m_j$$

若将 $\sum_{j=1}^n m_j$ 个 $\beta_j(t_{ij})$ 对同样个数的 $T_j(t_{ij})$ 作散点图, 这些散点将塌缩在函数 $M(T)$ 的曲线上。由于存在一些极端的情况, 例如 $m_j = 1 \forall j$, 故一般地 $M(T)$ 曲线的完整绘出要求遍历所有 $T \in \mathcal{T}$ 去做实验, $M(T)$ 的完整形式也可能是非连续的。