

## 1.DMF 的蒸发速度调控

液态溶液中挥发性成分的浓度 $c$ ，这里用 DMF 的质量 $m_D$ 与溶液的体积 $V_{sol}$ 的比例表示，即

$$c = \frac{m_D}{V_{sol}}, \text{ 其中 } V_{sol} \text{ 视为三种溶液体积的简单相加}$$

DMF 质量的变化

$$\frac{dm_D}{dt} = -k_1 c P_{sat}(T) \left(1 - k_h \frac{H}{100}\right)$$

其中常数 $k_1$ 是蒸发速率模型的参数，常数 $k_h$ 表示湿度对 DMF 的蒸发速率的抑制程度， $H\%$ 为空气湿度， $P_{sat}(T)$ 是 DMF 在温度  $T(K)$  的饱和蒸气压 (Pa)，

$$P_{sat} = 10^{A - \frac{B}{T+C}}, \text{ 其中 } A = 6.09451, B = 2725.96, C = 28.209$$

## 2.环丁砜与纤维素因溶解度变化产生的析出

环丁砜与纤维素分别析出的总质量：

$$m_{s_1} = \max\{0, m_s - m_D \cdot s_s\}$$

$$m_{c_1} = \max\{0, m_c - m_D \cdot s_c\}$$

其中， $m_{s_1}$ 为析出环丁砜的总质量， $m_{c_1}$ 为析出纤维素的总质量， $m_D$ 是体系中 DMF 的总质量， $m_s$ 是体系中环丁砜的总质量（包括溶解和未溶解部分）， $s_s$ 是 DMF 对环丁砜的溶解度， $s_c$ 是 DMF 对醋酸纤维素的溶解度， $m_c$ 是体系中醋酸纤维素的总质量（包括溶解和未溶解部分），

$$m_c = SC \times (m_D + m_s)$$

## 3.环丁砜小液滴的布朗运动

环丁砜小液滴运动的平均速度：

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{6D}{t}} (t \ll \tau_p)$$

其中 $\tau_p$ 为粒子的动量弛豫时间， $D$  为小液滴扩散系数，

$$D = \frac{kT}{n\pi\eta r_w}$$

其中  $k$  为玻尔兹曼常量， $T$  为绝对温度， $r_w$  为范德华半径，对于环丁砜  $r_w = 2.98\text{\AA}$ ， $n$  为校正因子，可从 Table8 数据中插值拟合得到， $\eta$  为颗粒-流体混合物的粘度，

$$\eta = \eta_0 \exp \left[ \frac{2.5}{\beta} \left( \frac{1}{(1 - \Phi_{c_1})^\beta} - 1 \right) \right]$$

其中 $\eta_0$ 为纯流体粘度， $\beta$ 为经验校正指数， $\Phi_{c_1}$ 为颗粒体积分数，这里假设只有析出的醋酸纤维素对粘度有影响，且颗粒-流体混合物的体积是混合前其中各成分的简单总和，故

$$\Phi_{c_1} = \frac{m_{c_1}/\rho_{c_1}}{m_D/\rho_D + m_S/\rho_S + m_c/\rho_c + m_{c_1}/\rho_{c_1}}$$

其中 $m_D$ 、 $m_S$ 、 $m_c$ 和 $m_{c_1}$ 分别表示溶解的 DMF、溶解的环丁砜、溶解的醋酸纤维素和析出的醋酸纤维素的质量， $\rho_D$ 、 $\rho_S$ 和 $\rho_c$ 分别表示 DMF、环丁砜和醋酸纤维素的密度。

#### 4. 液滴碰撞形成大液滴

单位时间内新增大液滴的质量 $m_{\text{form}}$ :

$$m_{\text{form}} = k_2 \cdot \bar{v} m_{s1}^2, \text{ 其中 } k_2 = \frac{3\sqrt{2}P_{\text{true}}}{4r\rho_S V_{\text{sol}}}$$

其中， $\bar{v}$ 为平均速度， $m_{s1}$ 为环丁砜小液滴总质量， $P_{\text{true}}$ 为可能触发融合过程的概率， $r$ 为环丁砜小液滴球形粒子的半径， $\rho_S$ 为环丁砜的密度， $V_{\text{sol}}$ 为溶液的体积。

#### 5. 大液滴通过吸收小液滴进一步增大

所有大液滴吸收质量 $m_{\text{grow}}$ :

$$m_{\text{grow}} = k_3 \bar{v} m_{s1} m_{s2}^{\frac{2}{3}}, \text{ 其中 } k_3 = \left( \frac{36\pi}{p_s^2} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{3k_2 k_v}{4\pi r^3 p_s V_{\text{sol}}}$$

其中 $m_{s2}$ 为环丁砜大液滴总质量。考虑到质量平衡，有

$$\begin{cases} \frac{dm_{s2}}{dt} = m_{\text{form}} + m_{\text{grow}} \\ \frac{dm_{s1}}{dt} = -m_{\text{form}} - m_{\text{grow}} \end{cases}$$

由于最终产物的孔面积占比 $P_p$ 与在蒸发过程结束后大液滴的质量成正比，

$$P_p = k_4 m_{s2}$$

