

Trabalho de Conclusão de Curso

Curso de Graduação em Física

PRODUÇÃO DO MONÓXIDO DE TITÂNIO EM ESTRELAS VARIÁVEIS

André Freitas Oliveira

Prof.Dr. Luiz Antonio Barreiro

Rio Claro (SP)

2016

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
Instituto de Geociências e Ciências Exatas
Câmpus de Rio Claro

ANDRÉ FREITAS OLIVEIRA

PRODUÇÃO DO MONÓXIDO DE TITÂNIO EM ESTRELAS
VARIÁVEIS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas -
Câmpus de Rio Claro, da Universidade
Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para
obtenção do grau de Bacharel em Física.

Rio Claro - SP
2016

523.8 Oliveira, André Freitas
Produção do monóxido de titânio em estrelas variáveis
/André Freitas Oliveira. - Rio Claro, 2016
57 f. : il., figs., gráfs., tabs.

Trabalho de conclusão de curso (bacharelado - Física) -
Universidade Estadual Paulista, Instituto de Geociências e
Ciências Exatas

Orientador: Luiz Antonio Barreiro

1. Estrelas. 2. TiO. 3. Miras. 4. Astroquímica. I. Título.

ANDRÉ FREITAS OLIVEIRA

PRODUÇÃO DO MONÓXIDO DE TITÂNIO EM ESTRELAS
VARIÁVEIS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas -
Câmpus de Rio Claro, da Universidade
Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para
obtenção do grau de Bacharel em Física.

Comissão Examinadora

_____ (orientador)

Rio Claro, ____ de _____ de _____.

Assinatura do(a) aluno(a)
orientador(a)

assinatura do(a)

AGRADECIMENTOS

À minha mãe Antonina e padrasto Sérgio por todo o apoio que me deram nesses anos de graduação.

À Luiz Antonio Barreiro pela sua orientação e atenciosidade nos meses de trabalho.

À Carmen Maria Andreazza pela orientação no trabalho de iniciação científica, sem o qual este trabalho de conclusão de não seria possível.

Aos meus amigos de república, Bruno Zucherato, Fábio Alberguini, Flávio Feres, João Guilherme, Leonardo Trotta, Carlos Marcelo e Mauro Antonio pela convivência e companheirismo que com certeza me marcaram positivamente.

Aos meus amigos e amigas da faculdade que conheci ao longo da graduação e que me proporcionaram bons momentos de descontração.

Aos amigos que fiz durante minha viagem pelo Brasil que, com certeza, me ajudaram a ponderar diferentes pontos de vista e que me ajudaram a ser uma pessoa melhor.

Aos professores e professoras que ao longo da graduação contribuíram nessa etapa da minha vida.

ΕΠΙΓΡΑΦΕ

“Isn't it funny how day by day nothing changes,
but when you look back everything is different.”

- *C.W.Lewis*

RESUMO

Miras são estrelas variáveis pulsantes em estágios avançados de evolução. Suas atmosferas são fontes de intensas bandas de absorção molecular atribuídas ao monóxido de titânio (TiO). Tem sido sugerido que a abundância do TiO atinge seu valor máximo próximo ao mínimo de luz. No entanto, os principais mecanismos de formação do TiO são pobremente conhecidos. Neste sentido, o estudo dos processos de formação e destruição do TiO no envelope circunstelares de estrelas Miras não só permitem entender os processos físicos e químicos que ocorrem nesses ambientes, como permitem verificar a correlação entre a abundância do monóxido de titânio e a curva de luz deste tipo de estrela. Assim, estudou-se os principais processos de formação e destruição do monóxido de titânio em envelopes circunstelares de estrelas Miras, onde foi determinada a sua evolução ao longo do raio da mesma. Apesar da abundância do TiO variar de forma satisfatória para as diferentes fases estelares, os valores obtidos para sua abundância não seriam suficientes para explicar sua curva de luz. Os motivos para isto são discutidos em detalhes.

palavras-chave: TiO. Miras. Estrelas.

ABSTRACT

Mira are pulsating variable stars in advanced stages of evolution. Their atmospheres are sources of intense absorption bands attributed to molecular titanium monoxide (TiO). It has been suggested that the abundance of TiO reaches its maximum value near the minimum light. In this sense, the study of the processes of formation and destruction of TiO in circumstellar envelopes of Mira stars, not only allows us to understand the physical and chemical processes that occur in these environments, as it allows to verify the correlation between the abundance of TiO and its light curve. However, the main mechanisms of formation and destruction of TiO are poorly known and, consequently, the possible correlation between the abundance of this species and the light curve. In these sense, we studied the main processes of formation and destruction of titanium monoxide in molecular layers of Mira atmospheres and determined its temporal variation as function of the stellar radius. The TiO profile along the radius was expected for the different stellar phase, however its abundance is not enough to explain the light curve. The reasons behind it are discussed in details.

Keywords: TiO. Miras. Stars.

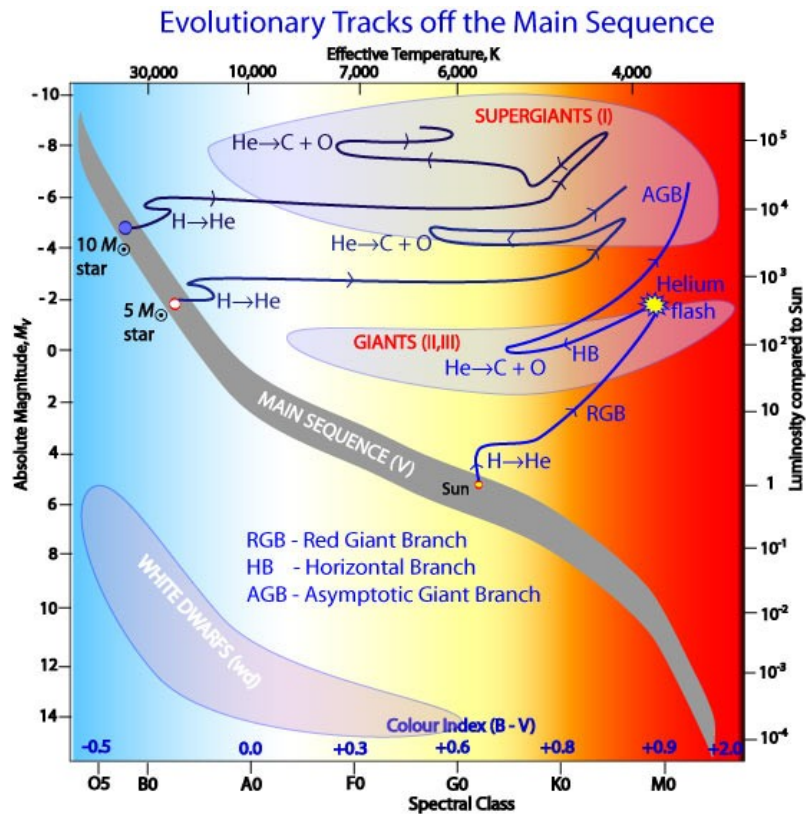
SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	8
2 OBJETIVOS.....	10
3 METODOLOGIA.....	10
3.1 O modelo físico.....	11
3.2 O modelo químico.....	12
3.3 O método numérico.....	13
4 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	15
5 CONCLUSÕES.....	24
REFERÊNCIAS.....	27
APÊNDICE A – LISTA DE REAÇÕES QUÍMICAS DAS MOLÉCULAS ENVOLVIDAS NA SÍNTESE E DESTRUIÇÃO DO TiO.....	30
APÊNDICE B – AS CONSTANTES UTILIZADAS NO MODELO E A PROGRAMAÇÃO PARA A VARIAÇÃO DA TEMPERATURA E DENSIDADE.....	36
APÊNDICE C – PROGRAMAÇÃO PARA OS COEFICIENTES DE TAXA.....	37
APÊNDICE D – PROGRAMAÇÃO PARA A TAXA DE VARIAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS.....	44
APÊNDICE E – PROGRAMAÇÃO PARA AS EQUAÇÕES DE FORMAÇÃO E DESTRUIÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS.....	51
APÊNDICE F – PROGRAMAÇÃO PARA O INTEGRADOR NUMÉRICO.....	54

1 INTRODUÇÃO

Miras (ou maravilhosas) são estrelas que se encontram no ramo assintótico (estrelas-AGB *Asymptotic Giant Branch*) no diagrama Hertzsprung-Russel (Figura 1), com massas iniciais menores que 8 massas solares, as quais durante a sua evolução se tornaram variáveis pulsantes. Os mecanismos responsáveis pelas pulsações são explicados por várias teorias (FABAS, et al. 2011). Em suma, são estrelas que variam com o tempo em luminosidade e raio, expandindo-se e contraindo-se, dependendo do tamanho da mesma, em períodos que variam de 80 a 500 dias. As pulsações expandem a atmosfera além da configuração de equilíbrio hidrostático, causando perdas de massa da ordem de $10^{-4} - 10^{-7}$ massas solares por ano. Apresentam luminosidades com amplitudes de variação superiores a 2,5 magnitudes e podem alcançar variações em sua luz visível maiores que 1000 vezes em algumas centenas de dias. Possuem tamanhos extraordinários; o tamanho típico de uma Mira é de 2 unidades astronômicas (REID e GOLDSTON, 2002; CASTELAZ e LUTTERMOSER, 1997; LUTTERMOSER, 2009).

Figura 1 – Diagrama Hertzsprung-Russel ilustrando os caminhos possíveis para estrelas com diferentes massas e enfatizando os ramos RGB, HB e AGB.



Fonte: Adaptado de

http://outreach.atnf.csiro.au/education/senior/astrophysics/stellarevolution_postmain.html (acessado em 23/12/15 as 18:00 h).

Devido ao grande tamanho das Miras, a temperatura de suas atmosferas é baixa (< 4000 K), permitindo a formação de moléculas. As atmosferas das Miras de tipo espectral M (abundância de oxigênio maior que a do carbono) e S (abundância de oxigênio aproximadamente igual a do carbono) apresentam espectros ópticos com intensas bandas de absorção atribuídas ao monóxido de titânio (TiO).

Apesar de a grande quantidade de dados observacionais sobre o monóxido de titânio em atmosferas de estrelas de tipo espectral tardio e de seu considerável impacto na sua estrutura, pouco se sabe sobre sua síntese (ANDREAZZA et al. 2012). Têm sido sugerido que o TiO se forma através da reação química $Ti + O \rightarrow TiO + hv$, à medida que a estrela esfria ao se aproximar do mínimo de luz, ou seja entre 2000 e 1600 K. O TiO, ao atingir uma abundância máxima próximo ao mínimo de luz, seria capaz de absorver a maioria dos fótons no visível e produziria o formato

observado das curvas de luz. Em temperaturas menores que 1600 K, o TiO se condensaria, formando pequenos grãos (REID e GOLDSTON 2002).

No entanto, os coeficientes de taxa de formação do TiO em função da temperatura, através da associação radiativa dos átomos de Ti e O, $Ti + O \rightarrow TiO + hv$, foram obtidos recentemente, através de métodos teóricos (ANDREAZZA et al. 2012), sendo muito lenta e incapaz de formar uma grande quantidade de TiO, como sugerido por REID e GOLDSTON (2002). Assim, faz-se necessário avaliar novas formas de produção e destruição do TiO que sejam compatíveis com o tipo de ambiente físico e químico presente nas atmosferas dessas estrelas, levando-se em conta as moléculas utilizadas no modelo e seus coeficientes de taxa.

2 OBJETIVOS

Analisar os processos de formação do TiO, já que uma vez formado, o TiO é extremamente eficiente na absorção de fótons no espectro visível, e determinar a evolução temporal da sua abundância, com o intuito de entender o impacto de sua formação na estrutura da atmosfera das Miras, através de simulações computacionais.

O interesse foi de obter a abundância do monóxido de titânio ao longo do raio da estrela levando em consideração a variação da temperatura e densidade.

3 METODOLOGIA

Para analisar e simular os processos físico-químicos de atmosferas de estrelas é necessário utilizar dois modelos em um único objeto computacional. O modelo químico provê informações das abundâncias relativas de espécies químicas que compõem o meio gasoso que, por sua vez, recebe informações do código físico que fornece as condições físicas reinantes no meio em questão.

3.1 O modelo físico

Os modelos físicos que simulam a evolução temporal das Miras são complexos, muitos envolvem choques, turbulência, magneto-hidrodinâmica, dentre outros mecanismos. Para o caso em questão, o modelo físico que será utilizado será o proposto por REID e GOLDSTON (2002). É um modelo hidrostático simples, que segundo os autores é adequado para descrever a evolução temporal do TiO. Tal modelo assume que a temperatura (T) e o raio (R) superficiais variam com a fase estelar (ϕ) segundo as equações,

$$T = T_0 + \Delta T \cos(\phi), \quad (1)$$

$$R = R_0 + \Delta R \cos(\phi + \pi), \quad (2)$$

onde, T_0 e R_0 são a temperatura e o raio fiduciais que permitem reproduzir a temperatura e o raio superficiais observados. Por exemplo, para a Mira χ Cygni os valores de T_0 e R_0 são, respectivamente, 2200 K e 2.1 AU.

A temperatura e a densidade decrescem com o raios (r) segundo as equações,

$$T^4(r) = T^4 \left[1 - \sqrt{1 - (R/r)^2} \right], \quad (3)$$

$$n(r) \simeq n e^{-C \left[1 - (R/r)^2 \right]}, \quad (4)$$

onde, $C = \frac{2GM_{ef}m_H}{KTR}$, sendo M_{ef} a massa efetiva da estrela, m_H a massa do hidrogênio atômico, K a constante de Boltzmann e G a Constante gravitacional.

3.2 O modelo químico

Por sua vez, o modelo químico foi elaborado após a análise dos coeficientes de taxa de reação, ou seja, foi construída uma cadeia química onde constam as reações mais importante para a formação e destruição do TiO.

Para o carbono foi adotada a abundância solar (GREVESSE et al. 2010), bem como para os outros elementos químicos (P, Si, S, N e Ti) considerados no modelo, exceto o oxigênio, o qual varia segundo as razões entre carbono e oxigênio, $C/O = 0,75$, $C/O = 1$ e $C/O = 1,1$. No modelo foram consideradas apenas as reações de formação e destruição mais relevantes. Nesse sentido, foram selecionadas 144 reações envolvendo 7 elementos químicos e vários compostos moleculares, responsáveis pela síntese do TiO.

Para a reação $A + B \rightarrow AB + hv$, correspondem as seguintes equações diferenciais

$$\frac{dn(AB)}{dt} = -\frac{dn(A)}{dt} = -\frac{dn(B)}{dt} = k n(A) n(B), \quad (5)$$

onde, $n(AB)$ representa a abundância da espécie AB, etc., e k é o coeficiente de taxa, o qual, em geral, varia exponencialmente com a temperatura. Generalizando, para i equações químicas de formação e j equações de destruição de uma espécie X , a evolução temporal da espécie X é dada por

$$\frac{dn(X)}{dt} = \sum_i F_i(X) - \sum_j D_j(X), \quad (6)$$

onde, F representa os ganhos e D as perdas da espécie X . Para cada espécie química considerada na cadeia, existe uma equação do tipo (6). Todas as reações utilizadas no modelo e seus respectivos coeficientes de taxa estão explicitados no apêndice A.

3.3 O método numérico

O sistema formado pelas equações diferenciais ordinárias, que representam a formação e destruição das espécies envolvidas no problema, necessitam de um método numérico para integrá-las e, assim, fornecer as abundâncias de cada espécie em questão. Estas equações são classificadas como *stiff* porque convergem a taxas largamente distintas. Nesse sentido, faz-se necessário utilizar um método numérico específico para a resolução do problema.

Como ilustração, considere o seguinte sistema de equações diferenciais e suas respectivas condições iniciais a $t = 0$,

$$y' = 998y + 1998z \quad y(0) = 1 \quad (7)$$

$$z' = -999y - 1999z \quad z(0) = 0 \quad (8)$$

este sistema pode ser resolvido analiticamente e as soluções das equações (7) e (8) são, respectivamente (PRESS et. al, 1988)

$$y = 2e^{-t} - e^{-1000t} \quad (9)$$

$$z = -e^{-t} + e^{-1000t} \quad (10)$$

Nota-se que, em ambas as soluções, há um termo e^{-t} e um termo e^{-1000t} , que decaem por um fator e^{-1} , respectivamente, em tempos de 1 e $\frac{1}{1000}$. Estes dois valores são as constantes de tempo que irão controlar as velocidades de convergência de cada uma das exponenciais (VICHETTI, 2009). Assim, estas equações são consideradas *stiff* e o método numérico para resolver tal problema deve levar em conta as diferentes ordens de grandeza que aparecem nas constantes de tempo.

O primeiro método de resolução de problemas *stiff* foi desenvolvido por Gear em 1968, que foi publicado em seu livro de problemas de valores iniciais (GEAR,

1971). Com base neste método, Hindmarsh elaborou o primeiro pacote de resolução de equações diferenciais *stiff* (HINDMARSH, 1974). Depois disso, muitos outros pacotes foram surgindo, cujas variações se encontram na estrutura da resolução das matrizes Jacobianas, as quais são utilizadas de forma a reduzir o trabalho computacional.

O método multi-etapas mais popular para a resolução de problemas *stiff* são os *Backward differentiation formula* (BDF) (ASCHER e PETZOLD, 1998). Os BDF são uma família de métodos implícitos para a integração numérica de equações diferenciais ordinárias, usados para a resolução de problemas de valor inicial na forma

$$y' = f(t, y), y(t_0) = y_0 \quad (11)$$

O mais simples método BDF (BDF1) é o método de Euler,

$$y_n = y_{n-1} + h f(t_n, y_n) \quad (12)$$

A fórmula geral para o BDF pode ser escrita como

$$\sum_{i=0}^k \alpha_i y_{n-i} = h \beta_0 f(t_n, y_n), \quad (13)$$

onde h é o passo e α_i e β_0 são os coeficientes do método e dependem apenas da ordem k do método.

O método BDF, incluso no pacote *Implicit Differential-Algebraic* (IDA) do software Mathematica, se mostrou ser o mais eficiente para a resolução das equações utilizadas no modelo, provendo soluções contínuas e satisfatórias. Por padrão, a ordem máxima utilizada nos cálculos é 5 (WOLFRAM, 2014), que gera os coeficientes listados na tabela 1.

Tabela 1 - Coeficientes α_i e β_0 para o método BDF de ordem 5.

p	k	β_0	α_0	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5
1	1	1	1	-1				
2	2	$\frac{2}{3}$	1	$-\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$			
3	3	$\frac{6}{11}$	1	$-\frac{18}{11}$	$\frac{9}{11}$	$-\frac{2}{11}$		
4	4	$\frac{12}{25}$	1	$-\frac{48}{25}$	$\frac{36}{25}$	$-\frac{16}{25}$	$\frac{3}{25}$	
5	5	$\frac{60}{137}$	1	$-\frac{300}{137}$	$\frac{300}{137}$	$-\frac{200}{137}$	$\frac{75}{137}$	$-\frac{12}{137}$

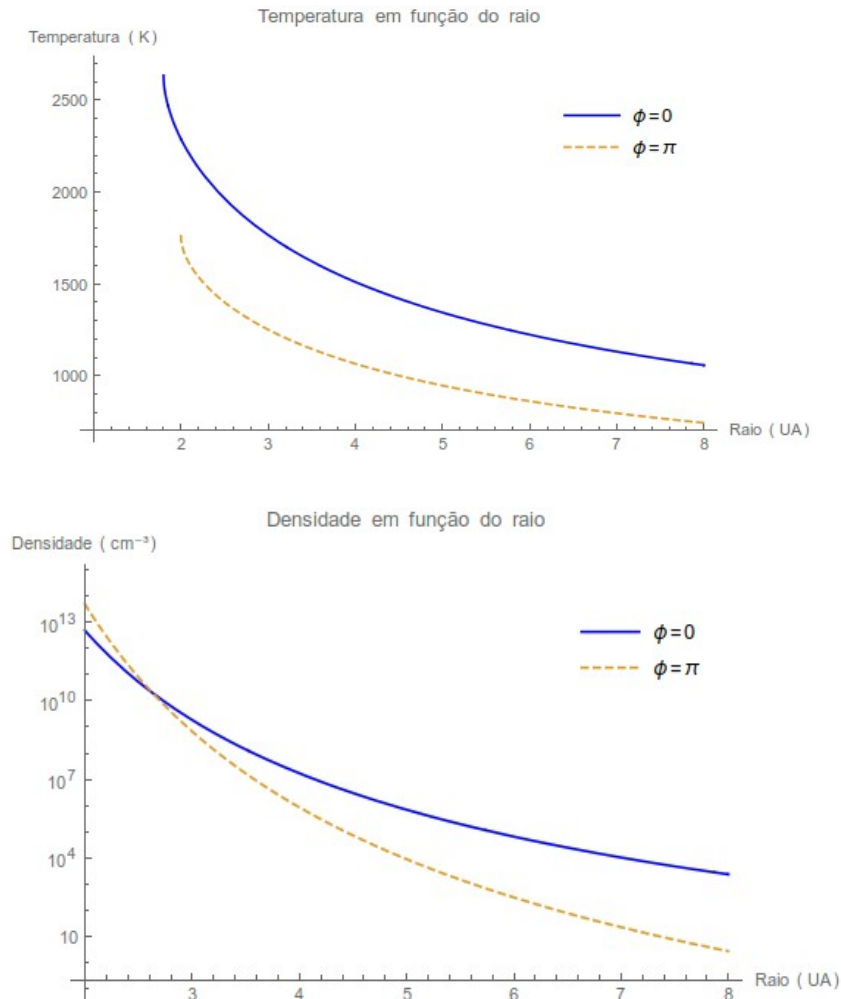
Fonte: ASCHER e PETZOLD, 1998

A programação completa utilizada para a solução do sistema de equações é mostrada nos apêndices B, C, D, E e F.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A temperatura do envelope estelar é um fator crucial na síntese do monóxido de titânio já que este permanece em seu estado gasoso apenas entre 1600 K e 3400 K, aproximadamente. Abaixo de 1600 K, o monóxido de titânio se condensa em grãos e é removido da fase gasosa (ANDREAZZA et al. 2012), acima de 3400 K, parece que tende a não se formar visto que suas bandas tornam-se muito fracas e desaparecem dos espectros das Miras (LOBEL et al. 2000). O monóxido de titânio se forma, essencialmente, na parte interna do envelope das Miras (Figura 2), próximo à fotosfera, onde a temperatura e a densidade são altas.

Figura 2 - Variação da temperatura e densidade em função o raio da estrela Mira.

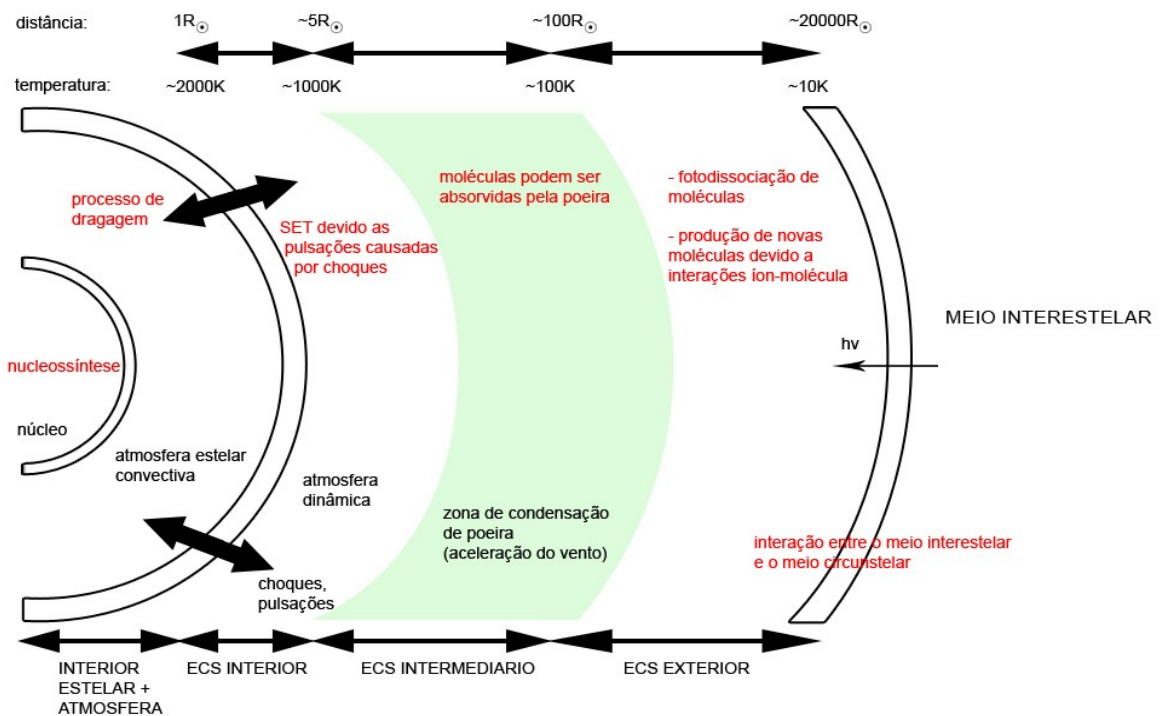


Fonte: Elaborado pelo autor

Uma ilustração (fora de escala) das diferentes regiões do envelope das AGB's, bem como alguns processos químicos e físicos que podem ocorrer nesses envelopes, assim como a distância e a temperatura em que os mesmos podem ocorrer são apresentados na Figura 3. A parte interna do envelope seria uma região dominada por reações químicas neutro-neutro (CHERCHNEFF 2006), por outro lado, nas partes mais externas, devido ao campo de radiação interestelar, ocorrem reações íons-neutro e processos de fotodissociação e ionização. Na parte

intermediária do envelope, ocorre a condensação de poeira, onde várias moléculas formadas nas partes internas podem ser adsorvidas pela poeira e outras simplesmente condensam.

Figura 3 - Desenho esquemático (fora de escala) de uma estrela AGB (onde 'SET' se entende por 'sem equilíbrio térmico' e 'ECS' por envelope circunstelar).



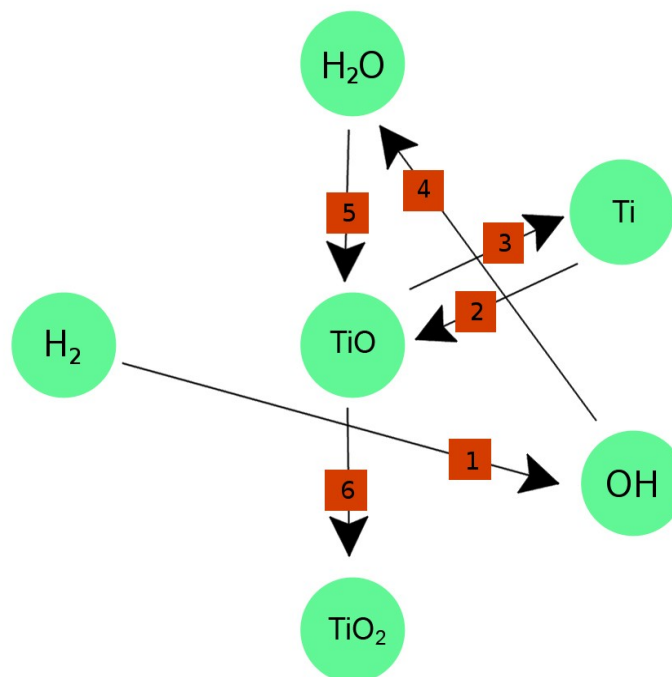
Fonte: Elaborado pelo autor

Nas Miras com envelopes ricos em oxigênio ($C/O < 1$), o carbono supostamente estaria ligado ao oxigênio na forma de CO (CHERRCHNEFF, 2006). O elemento químico mais abundante é o hidrogênio, seguido pelo oxigênio. Nesse sentido, é de se esperar que a síntese do monóxido de titânio seja controlada, principalmente, pelas reações químicas que envolvem oxigênio e o hidrogênio, ou seja, pelas reações: $Ti + H_2O \leftrightarrow TiO + H_2$ e $TiO + H_2O \leftrightarrow TiO_2 + H_2$. Em tal cenário, o vapor de água é formado, essencialmente, pela reação: $OH + H_2 \leftrightarrow H_2O + H$, que depende, principalmente, da formação do radical hidroxila, OH, ($O + H_2 \leftrightarrow OH + H$),

bem como do hidrogênio molecular, H_2 , ($H + H + H \leftrightarrow H_2 + H$ e $H + H + H_2 \leftrightarrow H_2 + H_2$).

Além dos compostos H_2O , H_2 e OH , outras espécies como o SiO , O_2 , CO_2 e NO , também podem contribuir na síntese do TiO nos envelopes das Miras. Um esquema da cadeia química com os principais processos pode ser vista na figura 4.

Figura 4 - Principais espécies envolvidas na síntese do TiO .

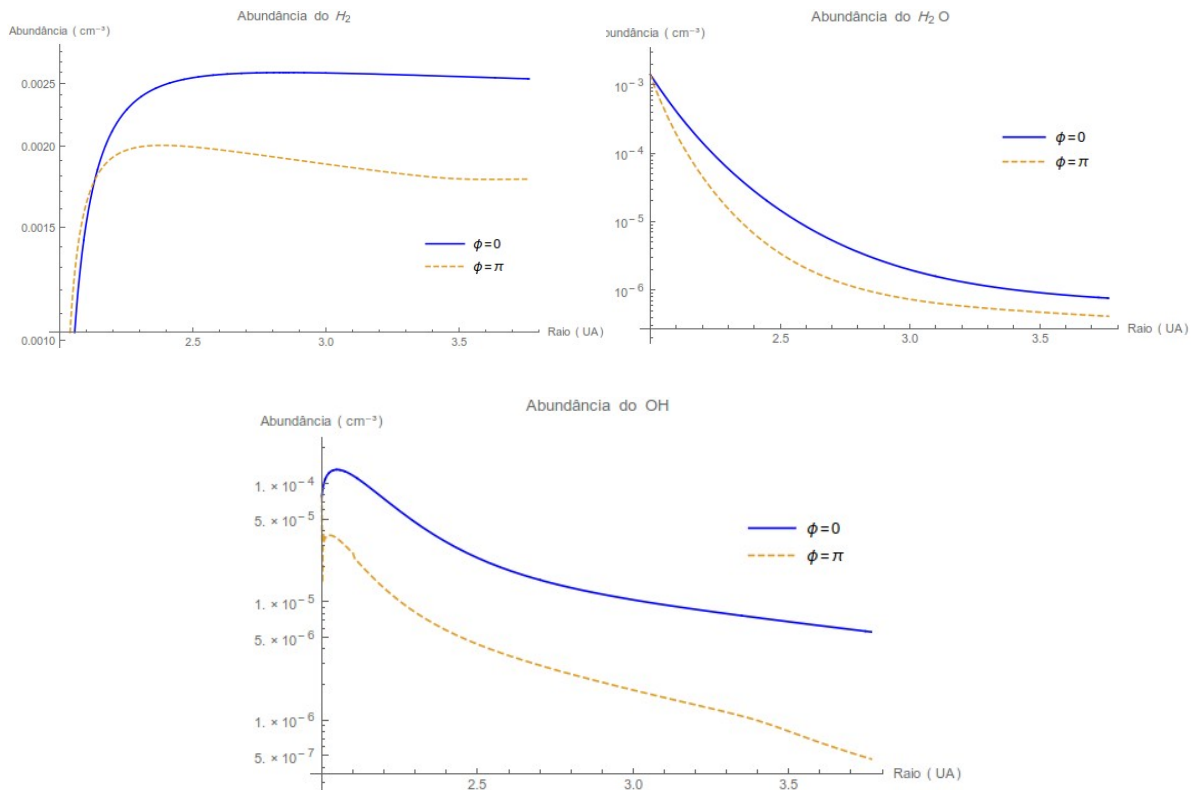


- 1 - O
- 2 - O_2 , NO, CO_2
- 3 - C
- 4 - H_2
- 5 - Ti
- 6 - H_2O

Fonte: Elaborado pelo autor

No presente trabalho, as moléculas H_2O , OH e H_2 mostraram ter uma abundância relativamente alta ao longo de todo o raio iterado, corroborando as pesquisas iniciais que indicavam que estas moléculas estariam diretamente ligadas a produção do TiO , bem como no controle da química das estrelas Miras (Figura 5).

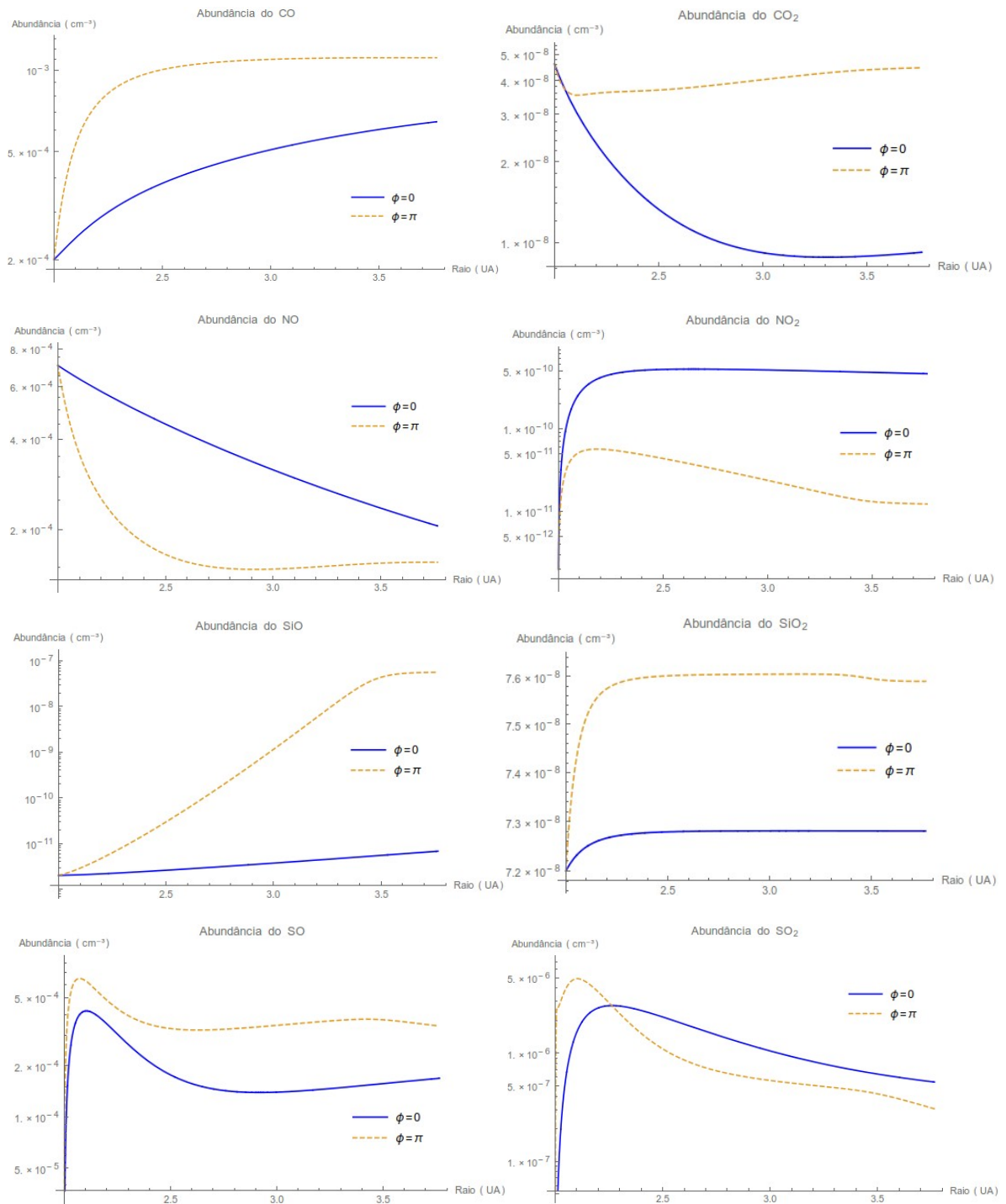
Figura 5 - Abundâncias (relativas ao gás total) das principais espécies envolvidas na síntese do TiO.



Fonte: Elaborado pelo autor

Contudo, o perfil obtido para a variação destas espécies não ficou de acordo com outro trabalho (CHERCHNEFF, 2006). Além disso, não foram observadas variações acentuadas em função do raio da estrela, mesmo levando em conta as diferentes razões C/O. Isto pode estar ligado ao fato de que no modelo adotado não foram levados em conta choques, por exemplo, os quais foram considerados por CHERCHNEFF (2006). A figura 6 mostra o perfil obtido para algumas espécies importantes na síntese do TiO.

Figura 6 - Abundâncias de algumas espécies moleculares para as diferentes fases estelares.

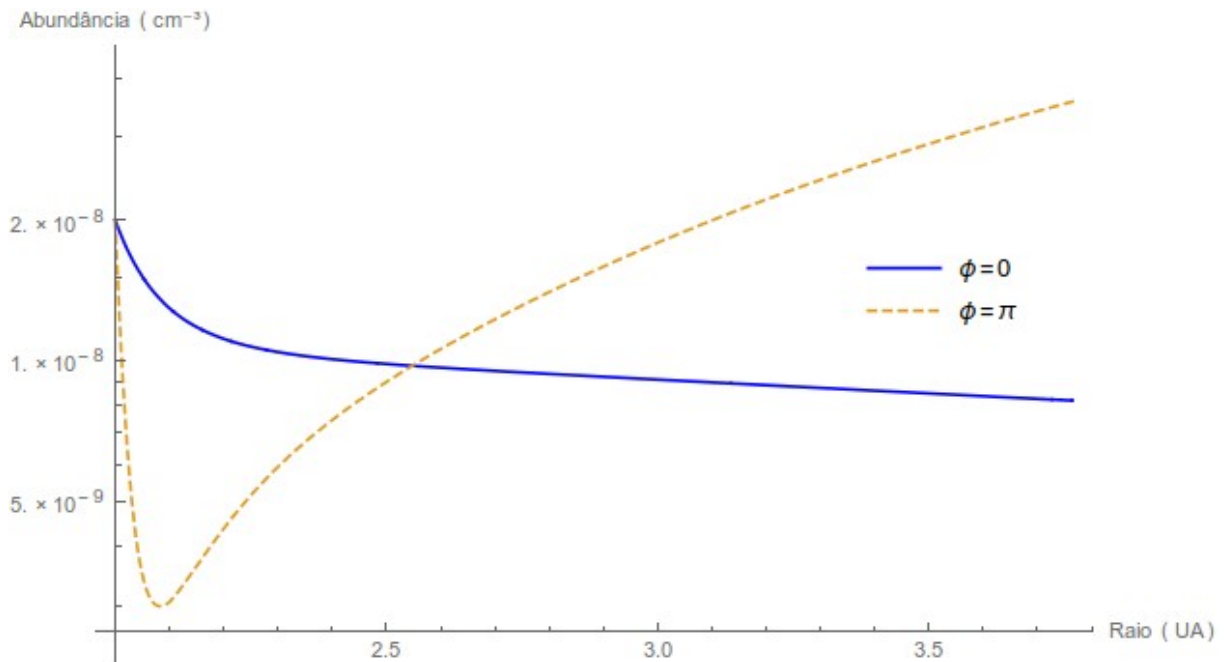


Fonte: Elaborado pelo autor

De acordo com REID e GOLDSTON (2002), a abundância do TiO aumentaria com a distância à fotosfera, ou seja, com o declínio da temperatura no extenso envelope das Miras. Esta abundância, em torno de 10^{-7} cm^{-3} seria suficiente para absorver a luz visível e produzir a curva de luz observada.

Neste sentido, os cálculos para a variação do TiO foram realizados levando-se em conta diferentes cenários onde foram alteradas as proporções entre carbono e oxigênio. Apesar das abundâncias obtidas se aproximarem do que REID e GOLDSTON (2002) propuseram ser o suficiente para se observar os efeitos estudados, nenhuma variação significativa foi observada na abundância do TiO para as três proporções C/O utilizadas, C/O = 0,75, C/O = 1, C/O = 1,1. Muitas podem ser as razões para este fato. Como dito anteriormente, este modelo hidrostático adotado não leva em conta a gama enorme de processos físicos e químicos que ocorrem nas atmosferas destas estrelas, tais como choque, turbulências etc., os quais podem ter grande influência na química. Além disso, o modelo adotado e os outros encontrados na literatura fazem simplificações relativamente grandes em relação ao próprio formato da estrela. Eles não levam em conta, por exemplo, que uma estrela não é perfeitamente esférica, mas tem um achatamento de 10% ou mais (KAROVSKA et al. 1991), o que tornaria os cálculos muito mais complexos. A figura 7 mostra o padrão obtido para o monóxido de titânio.

Figura 7 - Abundância do TiO para o raio considerado.



Fonte: Elaborado pelo autor

Como várias outras reações de formação do TiO foram consideradas, além da associação radiativa dos átomos de Ti e O, $\text{Ti} + \text{O} \rightarrow \text{TiO} + h\nu$, a faixa de temperatura utilizada para os cálculos foi maior. A integração foi configurada para terminar assim que a temperatura da atmosfera atingisse o valor mínimo de 1200 K.

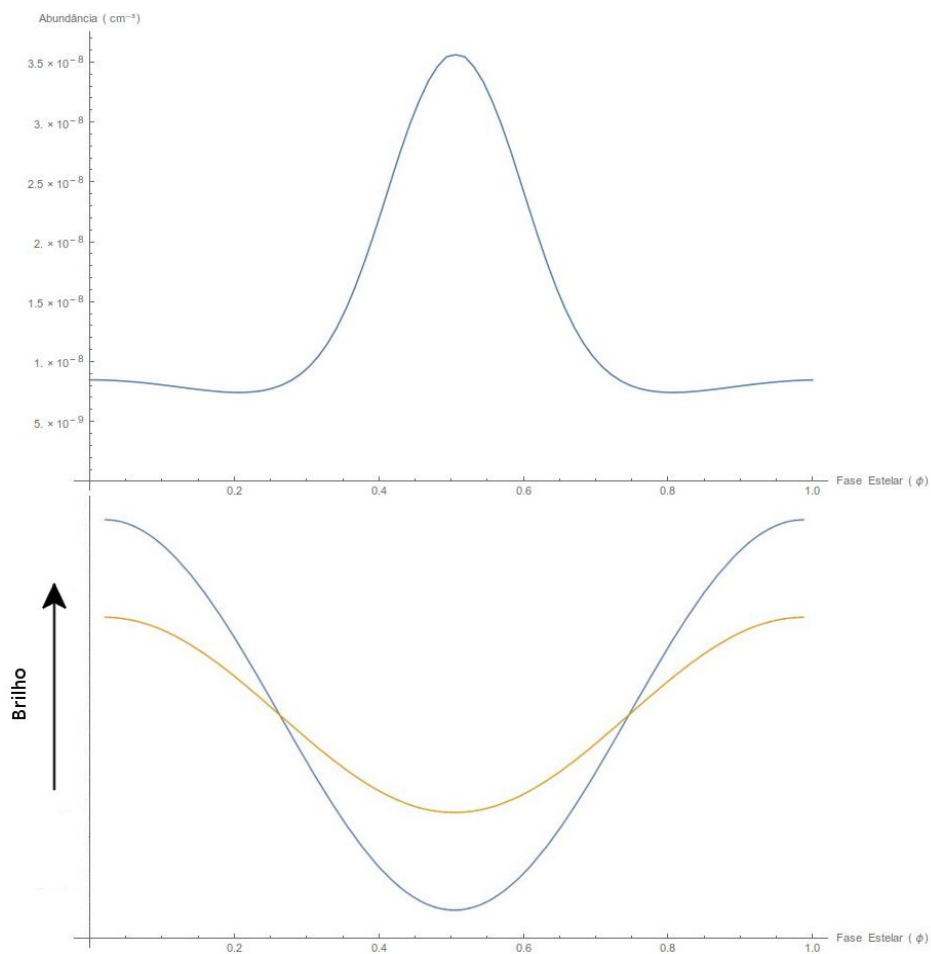
Apesar de ser um modelo simplificado, o perfil de variação do TiO ao longo do raio iterado está de acordo com o que seria esperado para as diferentes fases estelares consideradas, ou seja, uma abundância menor para o máximo de luz e uma abundância maior e crescente para o mínimo de luz. Contudo, a maior abundância obtida no mínimo de luz ficou abaixo da que seria suficiente para explicar a curva de luz. As explicações para isto e as deficiências do modelo foram expostas anteriormente.

Os parâmetros da estrela utilizados no modelo que proporcionaram um melhor comportamento da curva de variação da abundância do TiO são explicitados abaixo

$$\begin{aligned}
 T_0 &= 2200 \text{ K} \\
 R_0 &= 1.9 \text{ UA} \\
 n &= 3,5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3} \\
 M_{ef} &= 1.98 \times 10^{33} \text{ g} \\
 \Delta R &= 0,1 \text{ UA} \\
 \Delta T &= 440 \text{ K}
 \end{aligned}
 \tag{14}$$

Por fim, a figura 8 ilustra melhor os mecanismos que seriam os responsáveis pelo mínimo de luz na curva de luz de uma estrela Mira.

Figura 8 - Abundância do TiO em função da fase estelar e um comparativo entre a curva de luz observada experimentalmente (curva azul) e a obtida apenas em função da variação da temperatura (curva laranja).



Fonte: Elaborado pelo autor.

No gráfico mostrado na parte superior da imagem é plotada a abundância obtida para o TiO em função da fase estelar para um raio de 3,8 *UA*. Fica evidente que esta abundância cresce à medida que a fase estelar aumenta, atingindo seu máximo quando a fase está a meio ciclo (0,5), suportando as hipóteses iniciais. O gráfico subsequente, na mesma figura, ilustra o que seria de se esperar caso a curva de luz dependesse apenas da variação da temperatura da atmosfera estelar (curva em laranja), em contraste com o que realmente é observado (curva em azul). Nota-se que há uma grande dependência com a temperatura, mas o mínimo de luz não é explicado tão somente pela variação desta quantidade. Por se formar em maior quantidade em condições de menor temperatura e por ser extremamente eficiente na absorção de fótons no espectro visível, o TiO pode ser um dos principais responsáveis por este mínimo de luz observado experimentalmente.

5 CONCLUSÕES

Apesar de ser um modelo simples e não levar em conta a grande variedade de fenômenos físicos e químicos presentes nas atmosferas de estrelas variáveis, o modelo proposto neste trabalho foi suficiente para reproduzir as abundâncias esperadas da maioria das espécies químicas envolvidas na síntese do TiO, além de fornecer um resultado coerente para as variações de densidade e temperatura. Além disso, foi observada a variação destas abundâncias para as diferentes fases estelares, evidenciando o fato de que a temperatura e densidade têm papéis fundamentais na síntese destas espécies.

Contudo, nenhuma grande variação destas abundâncias foi observada ao longo do raio iterado, mesmo levando-se em conta as diferentes razões C/O, razões que deveriam alterar drasticamente a química presente na atmosfera. Isto evidencia que, apesar de ser um modelo satisfatório para explicar muitos aspectos de uma estrela Mira, sua simplicidade impossibilita que sejam obtidos padrões para as abundâncias das espécies químicas como os encontrados na literatura.

Para o TiO, REID e GOLDSTON (2002) afirmam que uma abundância de 10^{-7} cm^{-3} a uma distância de 3,8 UA seria o suficiente para se observar alguns dos padrões da curva de luz observados em estrelas Miras. No entanto, a abundância do TiO no modelo adotado ficou em torno de $3,5 \times 10^{-8} \text{ cm}^{-3}$ para este raio, reforçando a ideia de que as simplificações adotadas tiveram um grande impacto no resultado final.

O próximo passo a ser dado para refinar os resultados aqui apresentados seria uma revisão do modelo químico apresentado, onde reações entre o TiO e TiO_2 , bem como entre estes compostos e átomos de Ca devem ser consideradas.

De acordo com o trabalho de REID e MENTEN (1997), a abundância de elétrons ($e/H \approx 10^{-6}$) e íons atômicos, principalmente íons de sódio ($\text{Na}/H \approx 10^{-6}$), dentre outros (K^+ , Ca^+ e Al^+) são relativamente altas próximas às fotosferas de estrelas variáveis de longo período. Além das reações neutro-neutro, reações íon-neutro também deveriam ser incluídas no modelo químico, nas partes internas dos envelopes das Miras. Um outro passo a ser dado para melhorar os resultados, seria uma maior busca a literatura sobre as teorias que tentam modelar as atmosferas das Miras, já que algumas destas estrelas tem um comportamento “anormal”, exibindo curvas de luz assimétricas, que decaem lentamente e rapidamente aumentam em direção máximo de luz; outras apresentam “corcovas” secundárias nas suas curvas (REID e GOLDSTON, 2002).

Um modelo de atmosferas estelares simples, que considera as pulsações estelares, foi apresentado por REID e MENTEN (1997) para reproduzir a densidade de fluxo em 8.4 GHz de várias estrelas variáveis de longo período. Em tal modelo, a temperatura e a densidade variam com o raio (r) de acordo com as equações:

$$T = T_0 + \Delta T_s \cos(\phi + \phi_s), \quad (15)$$

$$n(r) \approx n_0 [1 + c_f |\cos(\phi + \phi_s)|]^m, \quad (16)$$

onde, $m = +1$ para $\cos(\phi + \phi_s) \geq 0$ e $m = -1$ para $\cos(\phi + \phi_s) < 0$, ΔT_s é a variação da temperatura, c_f é o fator de compressão da densidade, n_0 é a densidade média na

fotosfera e ϕ_s é a “fase” de propagação do choque. O modelo adota uma velocidade de propagação constante, V_s , que define ϕ_s , através da equação

$$\phi_s = 2\pi \frac{r - R_0}{V_s P}, \quad (17)$$

onde P e R_0 são o período e o raio da estrela. Tal modelo poderia ser utilizado em trabalhos futuros para estudar a formação do TiO em envelopes de Miras e possivelmente com resultados mais fiéis aos observados.

REFERÊNCIAS

ASCHER, U. M.; PETZOLD, L. R. **Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations**, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1988

ANDREAZZA C. M., ALMEIDA A. A., VICHETTI R. M., CECCATTO D. T., Radiative association of Ti and O atoms. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, v.427, p. 833-838, 2012

BYRNE, G. D. **Pragmatic experiments with Krylov methods in the stiff ODE setting**. Oxford: Oxford University Press, 1992.

BROWN, P.N., HINDMARSH, A.C. **Journal of Applied Mathematics and Computing**, v.31, p. 40-91, 1989.

CAMPBELL, M.L.; McCLEAN, R.E., Kinetics of neutral transition-metal atoms in the gas phase: oxidation reactions of Ti(a³F) from 300 to 600 K. **The Journal of Physical Chemistry**, 97, 7942 – 7946, 1993.

CHERCHNEFF, I., A chemical study of the inner winds of asymptotic giant branch stars, **Astronomy & Astrophysics**, 456, 1001-1012, 2006

CHURCHWELL, E., Interestellar Titanium Monoxide: Limits and Implications. **The Astronomical Journal**, 85, 1382, 1980

GEAR, C. W. **Numerical initial value problems in ordinary differential equations**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall Inc.,1971.

FABAS, N., LÈBRE, A., GILLET, D., Shock-induced polarized hydrogen emission lines in the Mira star o Ceti. **Astronomy & Astrophysics**, 535, A12, 2011.

GREVESSE et al., The Chemical Composition of the Sun, **Astrophysics Space Science**, 328, 179, 2010

HINDMARSH, A. C., **GEAR: Ordinary Differential Equation System Solver. BERKELEY**: Lawrence Livermore Laboratory Report UCID-30001, 1974.

KAROVSKA, M., NISENSEN, P., PAPALIOIOS, C., BOYLE, R. P. Asymmetries in the atmosphere of Mira, **The Astrophysical Journal**, 374, p.L51-L54, 1991.

LEEN, T. M., GRAFF, M. M. Oxygen chemistry of shocked interstellar clouds. III - Sulfur and oxygen species in dense clouds, **The Astrophysical Journal**, 325, 411, 1988.

LOBBEL, A., BAGNULO, S., DOYLE, J. G., POWER, C. Modelling near-IR spectra and mid-IR dust emission of Mira variables at different phases, **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, 317, 391, 2000.

LUTTERMOSER D.G., The biggest, baddest, coolest stars, **ASP Confere Series**, eds. D.G. , 2009.

LUTTERMORSER D.G., B.J. SMITH, Stencel, R.E., **Proceedings of the Biggest, Baddest, Coolest Stars**, San Francisco: ASP Conf. Series, 1997.

MANION, J. A., HUIE, R. E., LEVIN, R. D., BURGESS, D. R., ORKIN, V. L., TSANG, W., McGIVERN, W. S., HUDGENS, J. W., KNYAZEV, V. D., ATKINSON, D. B., CHAI, E., TEREZA, A. M., LIN, C.-Y., ALLISON, T. C., MALLARD, W. G., WESTLEY, F., HERRON, J. T., HAMPSON, R. F., FRIZZEL, D. H., **NIST Chemical Kinetics Database, NIST Standard Reference Database 17**, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 20899-8320, 2013.

REID, M.J., GOLDSTON, J.E., How Mira variables change visual light by a thousandfold, **The Astrophysical Journal**, 568:931-938, 2002.

REID, M.J., MENTEN, K.M., Radio photospheres of long-period variable stars. **The Astrophysical Journal**, 476, 327, 1997.

SMITH, I. W. M., HERBST, E., CHANG, Q., Rapid neutral-neutral reactions at low temperatures: a new network and first results for TMC-1. **Monthly Notices of the Royal Astronomical Society**, 350, 323, 2004.

VICHIETTI, R.M., **Síntese dos isótopos do carbono no meio interestelar**, Dissertação de Mestrado, UNESP, 2009.

WOODALL, J., AGÚNDEZ, M., MARKWICK-KEMPER, A. J., Millar, T. J, The UMIST database for Astrochemistry. **Astronomy & Astrophysics**, 466, 1197-120, 2006.

WOLFRAM RESEARCH, Inc., Mathematica, Version 10.1, Champaign, IL (2014).

APÊNDICE A

LISTA DE REAÇÕES QUÍMICAS DAS MOLÉCULAS ENVOLVIDAS NA SÍNTESE E DESTRUÇÃO DO TIO.

A tabela a seguir contém as reações químicas das moléculas usadas no modelo adotado e seus respectivos coeficientes de taxa ($k = \alpha(T/300)^\beta \exp(-\gamma/T)$). Devido a simplicidade do modelo, apenas reações neutro-neutro foram consideradas, apesar de ser bem sabido que a abundância de elétrons e íons é relativamente alta nas atmosferas de estrelas variáveis de longo período (REID e MENTEN, 1997) e, assim, reações íon-neutro deveriam ser consideradas para resultados mais precisos.

Tabela A.1 - Reações utilizadas no modelo químico. Os coeficientes de taxa não encontrados na literatura foram estimados

Reação	Produtos	α	β	γ	Citação
H + H + H	H ₂ + H	8.82e-33	0.0	0.0	MANION et al., 2013
H + H + H ₂	H ₂ + H ₂	8.85e-33	-0.60	0.0	MANION et al., 2013
H + OH	O + H ₂	6.99e-14	2.80	1950.0	MANION et al., 2013
H + H ₂ O	OH + H ₂	1.59e-11	1.20	9610.0	MANION et al., 2013
H + CO	OH + C	1.10e-10	0.50	77700.0	WOODALL et al., 2006
H + HCO	CO + H ₂	2.00e-10	0.00	0.0	MANION et al., 2013
H + NO	O + NH	9.29e-10	0.10	35220.0	MANION et al., 2013
H + NO	OH + N	3.60e-10	0.00	24910.0	MANION et al., 2013
H + O ₂	OH + O	2.61e-10	0.00	8156.0	MANION et al., 2013
H + HNO	OH + NH	2.40e-09	0.50	9010.0	MANION et al., 2013
H + HNO	NO + H ₂	4.50e-11	0.72	329.0	MANION et al., 2013
H + CO ₂	CO + OH	3.38e-10	0.00	13163.0	MANION et al., 2013
H + N ₂ O	N ₂ + OH	5.13e-14	3.15	3603.0	MANION et al., 2013

H + N ₂ O	NO + NH	4.96e-07	2.16	18700.0	MANION et al., 2013
H + N ₂ O	NO + OH	1.40e-10	0.00	740.0	MANION et al., 2013
H + SO	S + OH	5.90e-10	0.31	11100.0	Leen; Graff, 1988
H + SO	HS + O	1.79e-11	0.50	19930.0	Mitchell, 1984
H + OCS	HS + CO	1.23e-11	0.00	1949.0	MANION et al., 2013
H ₂ + O	OH + H	3.14e-13	2.70	3150.0	MANION et al., 2013
H ₂ + OH	H ₂ O + H	2.05e-12	1.52	1736.0	MANION et al., 2013
H ₂ + O ₂	OH + OH	3.16e-10	0.00	21890.0	MANION et al., 2013
C + OH	O + CH	2.25e-11	0.50	14800.0	WOODALL et al., 2006
C + OH	CO + H	1.00e-10	0.00	0.0	Smith et al., 2004
C + CO	C ₂ + O	2.94e-11	0.50	58025.0	WOODALL et al., 2006
C + HCO	CO + CH	1.00e-10	0.00	0.0	Smith et al., 2004
C + NO	CN + O	6.00e-11	0.16	0.0	Smith et al., 2004
C + NO	CO + N	9.00e-11	0.00	0.0	Smith et al., 2004
C + O ₂	CO + O	4.70e-11	0.34	0.0	Smith et al., 2004
C + OCN	CO + CN	1.00e-10	0.00	0.0	Smith et al., 2004
C + SO	S + CO	3.50e-11	0.00	0.0	Smith et al., 2004
C + SO	CS + O	3.50e-11	0.00	0.0	Smith et al., 2004
C + SO ₂	CO + SO	7.00e-11	0.00	0.0	Smith et al., 2004
CH + O	OH + C	2.52e-11	0.00	2381.0	MANION et al., 2013
CH + O	CO + H	6.60e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
CH + OH	HCO + H	1.44e-11	0.50	5000.0	WOODALL et al., 2006
CH + NO	HCN + O	1.20e-10	0.13	0.0	MANION et al., 2013
CH + NO	CN + OH	1.40e-10	0.00	0.0	MANION et al., 2013
CH + NO	HCO + N	1.16e-11	0.13	0.0	MANION et al., 2013
CH + NO	OCN + H	4.10e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
CH + O ₂	CO + OH	2.60e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
CH + O ₂	HCO + O	1.44e-11	0.70	3000.0	WOODALL et al., 2006

CH + CO ₂	HCO + CO	2.94e-13	0.50	3000.0	WOODALL et al., 2006
N + OH	O + NH	1.88e-11	0.10	10700.0	MANION et al., 2013
N + OH	NO + H	7.50e-11	0.18	0.0	Smith et al., 2004
N + HCO	CO + NH	5.71e-12	0.50	1000.0	WOODALL et al., 2006
N + NO	N ₂ + O	3.75e-11	0.00	26.0	MANION et al., 2013
N + HNO	NO + NH	2.94e-12	0.50	1000.0	WOODALL et al., 2006
N + HNO	N ₂ O + H	1.43e-12	0.50	1500.0	WOODALL et al., 2006
N + O ₂	NO + O	2.26e-12	0.86	3134.0	MANION et al., 2013
N + CO ₂	NO + CO	3.20e-13	0.00	1710.0	MANION et al., 2013
N + NO ₂	N ₂ + O + O	2.41e-12	0.00	0.0	MANION et al., 2013
N + NO ₂	NO + NO	1.00e-12	0.00	0.0	Smith et al., 2004
N + NO ₂	O ₂ + N ₂	1.00e-12	0.00	0.0	Smith et al., 2004
N + NO ₂	N ₂ O + O	3.00e-12	0.00	0.0	MANION et al., 2013
N + PO	P + NO	2.55e-12	0.00	0.0	Millar et al., 1987
N + SO	NS + O	4.68e-11	0.50	8254.0	Mitchell, 1984
N + SO	S + NO	1.73e-11	0.50	750.0	Mitchell, 1984
NH + O	OH + N	1.16e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
NH + O	NO + H	1.16e-10	0.00	0.0	MANION et al., 2013
NH + OH	H ₂ O + N	3.11e-12	1.20	0.0	MANION et al., 2013
NH + NO	N ₂ O + H	1.16e-10	1.03	420.0	MANION et al., 2013
NH + NO	N ₂ + OH	1.46e-11	0.58	37.0	MANION et al., 2013
NH + NO ₂	N ₂ O + OH	1.44e-13	0.00	-1140.0	MANION et al., 2013
O + OH	O ₂ + H	1.77e-11	0.00	-178.0	MANION et al., 2013
O + H ₂ O	OH + OH	1.85e-11	0.95	8571.0	MANION et al., 2013
O + C ₂	CO + C	1.00e-10	0.00	0.0	Smith et al., 2004
O + CN	NO + C	3.81e-11	0.50	14545.0	WOODALL et al., 2006
O + CN	CO + N	4.36e-11	0.46	364.0	MANION et al., 2013
O + HCN	CN + OH	6.21e-10	0.00	12439.0	MANION et al., 2013

O + HCN	CO + NH	7.30e-13	1.14	3742.0	MANION et al., 2013
O + N ₂	NO + N	2.51e-10	0.00	38602.0	MANION et al., 2013
O + HCO	CO + OH	5.00e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
O + SiH	SiO + H	1.00e-10	0.00	0.0	Smith et al., 2004
O + NO	O ₂ + N	1.18e-11	0.00	20413.0	MANION et al., 2013
O + HNO	NO + OH	6.00e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
O + HNO	O ₂ + NH	2.94e-12	0.50	3500.0	WOODALL et al., 2006
O + HNO	NO ₂ + H	1.00e-12	0.00	0.0	Smith et al., 2004
O + HS	S + OH	1.74e-11	0.67	956.0	MANION et al., 2013
O + HS	SO + H	8.25e-11	0.17	-254.0	MANION et al., 2013
O + SiC	SiO + C	5.00e-11	0.00	0.0	Smith et al., 2004
O + OCN	O ₂ + CN	4.02e-10	1.43	3501.0	MANION et al., 2013
O + SiN	SiO + N	5.75e-11	0.10	200.0	MANION et al., 2013
O + CO ₂	O ₂ + CO	2.46e-11	0.00	26567.0	MANION et al., 2013
O + N ₂ O	NO + NO	1.15e-10	0.00	13400.0	MANION et al., 2013
O + N ₂ O	O ₂ + N ₂	1.66e-10	0.00	14100.0	MANION et al., 2013
O + CS	S + CO	2.48e-10	0.65	783.0	MANION et al., 2013
O + CS	SO + C	4.68e-11	0.50	28940.0	Mitchell, 1984
O + NO ₂	O ₂ + NO	6.50e-12	0.00	-120.0	MANION et al., 2013
O + NS	S + NO	1.00e-10	0.00	0.0	Smith et al., 2004
O + NS	SO + N	1.00e-11	0.00	0.0	Smith et al., 2004
O + SO	S + O ₂	6.60e-13	0.00	2760.0	Leen; Graff, 1988
O + OCS	CO ₂ + S	8.30e-11	0.00	5530.0	MANION et al., 2013
O + OCS	SO + CO	1.60e-11	0.00	2150.0	MANION et al., 2013
O + SO ₂	SO + O ₂	9.01e-12	0.00	9837.0	MANION et al., 2013
O + S ₂	SO + S	1.70e-11	0.00	0.0	Smith et al., 2004
OH + OH	H ₂ O + O	1.65e-12	1.14	50.0	Smith et al., 2004
OH + CN	HCN + O	1.00e-11	0.0	1000.0	MANION et al., 2013

OH + HCN	CN + H ₂ O	1.87e-13	1.50	3887.0	MANION et al., 2013
OH + CO	CO ₂ + H	2.81e-13	0.00	176.0	Smith et al., 2004
OH + Si	SiO + H	100e-10	0.00	0.0	Smith et al., 2004
OH + NO	NO ₂ + H	5.20e-12	0.00	15100.0	WOODALL et al., 2006
OH + HNO	NO + H ₂ O	4.44e-12	1.37	-169.0	MANION et al., 2013
OH + S	SO + H	6.60e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
OH + CS	OCS + H	9.39e-14	1.12	800.0	Leen; Graff, 1988
OH + SiO	SiO ₂ + H	2.00e-12	0.00	0.0	Smith et al., 2004
OH + SO	SO ₂ + H	8.60e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
H ₂ O + F	HF + OH	1.40e-11	0.00	0.0	MANION et al., 2013
C ₂ + O ₂	CO + CO	1.50e-11	0.00	4300.0	MANION et al., 2013
CN + NO	N ₂ + CO	1.60e-13	0.00	0.0	Smith et al., 2004
CN + NO	OCN + N	1.62e-10	0.00	21205.0	MANION et al., 2013
CN + O ₂	NO + CO	5.01e-12	0.46	-8.0	MANION et al., 2013
CN + O ₂	OCN + O	1.86e-11	0.13	-40.0	MANION et al., 2013
CN + NO ₂	NO + OCN	3.93e-11	0.00	-199.0	MANION et al., 2013
CO + O ₂	CO ₂ + O	5.99e-12	0.00	24075.0	MANION et al., 2013
CO + N ₂ O	CO ₂ + N ₂	1.62e-13	0.00	8780.0	MANION et al., 2013
CO + NO ₂	CO ₂ + NO	1.48e-10	0.00	17000.0	MANION et al., 2013
N ₂ + O ₂	N ₂ O + O	1.00e-10	0.00	55200.0	WOODALL et al., 2006
Si + CO	SiO + C	1.30e-09	0.00	34513.0	MANION et al., 2013
Si + NO	SiO + N	9.00e-11	0.96	28.0	Smith et al., 2004
Si + O ₂	SiO + O	1.72e-10	0.53	17.0	Smith et al., 2004
Si + CO ₂	SiO + CO	2.72e-11	0.00	282.0	MANION et al., 2013
NO + NO	O ₂ + N ₂	2.51e-11	0.00	30653.0	MANION et al., 2013
NO + NO	N ₂ O + O	7.22e-12	0.00	33155.0	MANION et al., 2013
NO + O ₂	NO ₂ + O	2.80e-12	0.00	23400.0	WOODALL et al., 2006
NO + S	SO + N	1.75e-10	0.00	20200.0	MANION et al., 2013

NO + OCN	N ₂ O + CO	3.47e-11	1.33	242.0	MANION et al., 2013
NO + OCN	N ₂ + CO ₂	4.55e-11	1.33	242.0	MANION et al., 2013
NO + N ₂ O	NO ₂ + N ₂	2.92e-13	2.23	23292.0	MANION et al., 2013
O ₂ + S	SO + O	4.74e-13	1.41	-439.0	MANION et al., 2013
O ₂ + OCN	CO ₂ + NO	1.32e-12	0.00	0.0	MANION et al., 2013
O ₂ + OCN	NO ₂ + CO	8.10e-11	0.00	773.0	WOODALL et al., 2006
O ₂ + SO	SO ₂ + O	1.10e-14	1.89	1538.0	MANION et al., 2013
S + SO	S ₂ + O	1.73e-11	0.50	11500.0	Mitchell, 1984
S + SO ₂	SO + SO	9.76e-12	0.00	4545.0	MANION et al., 2013
Ti + NO ₂	TiO + NO	6.90e-11	0.00	0.0	Campbell; McClean, 1993
Ti + SO ₂	TiO + SO	1.03e-10	0.00	0.0	Campbell; McClean, 1993
Ti + O ₂	TiO + O	1.62e-11	0.00	0.0	Campbell; McClean, 1993
Ti + NO	TiO + N	1.59e-11	0.00	0.0	Campbell; McClean, 1993
Ti + CO ₂	TiO + CO	1.03e-11	0.00	0.0	Campbell; McClean, 1993
Ti + O	TiO + hv	5.94e-17	0.17	-65.9	Andreazza et al., 2012
TiO + C	Ti + CO	1.00e-10	0.00	0.0	Churchwell, 1980
Ti + CO	TiO + C	1.00e-11	0.00	4800.0	Estimado
Ti + OH	TiO + H	1.00e-11	0.00	4800.0	Estimado
Ti + SiO	TiO + Si	1.00e-11	0.00	4800.0	Estimado
Ti + H ₂ O	TiO + H ₂	1.00e-11	0.00	4800.0	Estimado
TiO + H ₂ O	TiO ₂ + H ₂	1.00e-11	0.00	4800.0	Estimado

Fonte: Elaborado pelo autor

APÊNDICE B

AS CONSTANTES UTILIZADAS NO MODELO E A PROGRAMAÇÃO PARA A VARIACÃO DA TEMPERATURA E DENSIDADE.

Os valores das constantes adotadas para os cálculos que produziram um melhor *fitting* são explicitados abaixo. As fórmulas que serão apresentadas neste e nos próximos apêndices estão no formato da linguagem de programação do software Mathematica 10.3.0.

$$\begin{aligned}
 T_0 &= 2200 \text{ K}; \\
 \Delta T &= 440 \text{ K}; \\
 UA &= 1,49598 \times 10^{13} \text{ cm}; \\
 R_0 &= 1,9 \text{ UA}; \\
 \Delta R &= 0,1 \text{ UA}; \\
 n &= 3.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}; \\
 G &= 6,67384 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1} \text{ s}^{-2}; \\
 K &= 1,38065 \times 10^{-16} \text{ ergK}^{-1}; \\
 m_h &= 1,67353 \times 10^{-24} \text{ g}; \\
 M_{ef} &= 1.98892 \times 10^{-33} \text{ g};
 \end{aligned} \tag{18}$$

As fórmulas para o cálculo da temperatura e raio superficiais são

$$Te[\phi_] := T_0 + \Delta T \text{Cos}[\phi];$$

$$Ra[\phi_] := R_0 + \Delta R \text{Cos}[\phi];$$

e, assim, as fórmulas para o cálculo da temperatura e densidades em função do raio se resumem a

$$T[r_ , \phi_] := Te[\phi] \sqrt[4]{(1 - \text{Sqrt}[1 - (\text{Ra}[\phi]/r)^2])};$$

$$\text{dens}[r_ , \phi_] := n \text{Exp}[-((2GM_{ef}m_h)/(K Te[\phi]Ra[\phi]AU))(1 - \text{Sqrt}[Ra[\phi]/r])];$$

APÊNDICE C

PROGRAMAÇÃO PARA OS COEFICIENTES DE TAXA

Com base na tabela A.1 do apêndice A, foi possível calcular cada coeficiente de taxa. O código é mostrado em seguida.

$$\begin{aligned}
 k1[r_-, \phi_-] &:= (6.99 * 10^{-14}) ((t[r, \phi] / 300)^{2.8}) * \text{Exp}[-1950 / t[r, \phi]] ; \\
 k2[r_-, \phi_-] &:= (1.59 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{1.2}) * \text{Exp}[-9610 / t[r, \phi]] ; \\
 k3[r_-, \phi_-] &:= (4.5 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.72}) * \text{Exp}[-329 / t[r, \phi]] ; \\
 k4[r_-, \phi_-] &:= 2 * 10^{-10} ; \\
 k5[r_-, \phi_-] &:= (1.1 * 10^{-10}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.5}) * \text{Exp}[-77700 / t[r, \phi]] ; \\
 k6[r_-, \phi_-] &:= (9.29 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.1}) * \text{Exp}[-35220 / t[r, \phi]] ; \\
 k7[r_-, \phi_-] &:= (3.60 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-24910 / t[r, \phi]] ; \\
 k8[r_-, \phi_-] &:= (2.61 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-8156 / t[r, \phi]] ; \\
 k9[r_-, \phi_-] &:= (2.4 * 10^{-9}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.5}) * \text{Exp}[-9010 / t[r, \phi]] ; \\
 k10[r_-, \phi_-] &:= (3.38 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-13163 / t[r, \phi]] ; \\
 k11[r_-, \phi_-] &:= (5.13 * 10^{-14}) ((t[r, \phi] / 300)^{3.15}) * \text{Exp}[-3603 / t[r, \phi]] ; \\
 k12[r_-, \phi_-] &:= (4.96 * 10^{-7}) ((t[r, \phi] / 300)^{2.16}) * \text{Exp}[-18700 / t[r, \phi]] ; \\
 k13[r_-, \phi_-] &:= (1.4 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-740 / t[r, \phi]] ; \\
 k14[r_-, \phi_-] &:= (5.9 * 10^{-10}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.31}) * \text{Exp}[-11100 / t[r, \phi]] ; \\
 k15[r_-, \phi_-] &:= (1.79 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.5}) * \text{Exp}[-19930 / t[r, \phi]] ; \\
 k16[r_-, \phi_-] &:= (1.23 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-1949 / t[r, \phi]] ;
 \end{aligned}$$

$$k17[r_-, \phi_-] := (3.14 * 10^{-13}) ((t[r, \phi] / 300)^{2.7}) * \text{Exp}[-3150 / t[r, \phi]] ;$$

$$k18[r_-, \phi_-] := (2.05 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{1.52}) * \text{Exp}[-1736 / t[r, \phi]] ;$$

$$k19[r_-, \phi_-] := (3.16 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-21890 / t[r, \phi]] ;$$

$$k20[r_-, \phi_-] := (2.25 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.5}) * \text{Exp}[-14800 / t[r, \phi]] ;$$

$$k21[r_-, \phi_-] := 1 * 10^{-10} ;$$

$$k22[r_-, \phi_-] := (2.94 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.5}) * \text{Exp}[-58025 / t[r, \phi]] ;$$

$$k23[r_-, \phi_-] := 1.10 * 10^{-10} ;$$

$$k24[r_-, \phi_-] := (1.59 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.16}) ;$$

$$k25[r_-, \phi_-] := 9 * 10^{-11} ;$$

$$k26[r_-, \phi_-] := (4.7 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.34}) ;$$

$$k27[r_-, \phi_-] := 1 * 10^{-10} ;$$

$$k28[r_-, \phi_-] := 3.5 * 10^{-11} ;$$

$$k29[r_-, \phi_-] := 3.5 * 10^{-11} ;$$

$$k30[r_-, \phi_-] := 7 * 10^{-11} ;$$

$$k31[r_-, \phi_-] := (2.52 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-2381 / t[r, \phi]] ;$$

$$k32[r_-, \phi_-] := 6.6 * 10^{-11} ;$$

$$k33[r_-, \phi_-] := (1.44 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.5}) * \text{Exp}[-5000 / t[r, \phi]] ;$$

$$k34[r_-, \phi_-] := (1.59 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.13}) ;$$

$$k35[r_-, \phi_-] := 1.4 * 10^{-10} ;$$

$$k36[r_-, \phi_-] := (1.16 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.13}) ;$$

$$k37[r_-, \phi_-] := 4.1 * 10^{-11} ;$$

$$k38[r_-, \phi_-] := 2.6 * 10^{-11} ;$$

$$\begin{aligned}
k39[r_-, \phi_-] &:= (1.44 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.7}) * \text{Exp}[-3000/t[r, \phi]] ; \\
k40[r_-, \phi_-] &:= (2.94 * 10^{-13}) ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-3000/t[r, \phi]] ; \\
k41[r_-, \phi_-] &:= (1.88 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.1}) * \text{Exp}[-10700/t[r, \phi]] ; \\
k42[r_-, \phi_-] &:= (7.5 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.18}) ; \\
k43[r_-, \phi_-] &:= (5.71 * 10^{-12}) ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-1000/t[r, \phi]] ; \\
k44[r_-, \phi_-] &:= (3.75 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-26/t[r, \phi]] ; \\
k45[r_-, \phi_-] &:= (2.94 * 10^{-12}) ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-1000/t[r, \phi]] ; \\
k46[r_-, \phi_-] &:= (1.43 * 10^{-12}) ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-1500/t[r, \phi]] ; \\
k47[r_-, \phi_-] &:= (2.26 * 10^{-12}) ((t[r, \phi]/300)^{0.6}) * \text{Exp}[-3134/t[r, \phi]] ; \\
k48[r_-, \phi_-] &:= (3.2 * 10^{-13}) * \text{Exp}[-1710/t[r, \phi]] ; \\
k49[r_-, \phi_-] &:= 2.41 * 10^{-12} ; \\
k50[r_-, \phi_-] &:= 1 * 10^{-12} ; \\
k51[r_-, \phi_-] &:= 1 * 10^{-12} ; \\
k52[r_-, \phi_-] &:= 3 * 10^{-12} ; \\
k53[r_-, \phi_-] &:= 2.55 * 10^{-12} ; \\
k54[r_-, \phi_-] &:= (4.68 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-8254/t[r, \phi]] ; \\
k55[r_-, \phi_-] &:= (1.73 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-750/t[r, \phi]] ; \\
k56[r_-, \phi_-] &:= 1.16 * 10^{-11} ; \\
k57[r_-, \phi_-] &:= 1.16 * 10^{-10} ; \\
k58[r_-, \phi_-] &:= 3.11 * 10^{-12} ; \\
k59[r_-, \phi_-] &:= (1.16 * 10^{-10}) ((t[r, \phi]/300)^{1.03}) * \text{Exp}[-420/t[r, \phi]] ; \\
k60[r_-, \phi_-] &:= (1.46 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.58}) * \text{Exp}[-37/t[r, \phi]] ;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
k61[r_-, \phi_-] &:= (1.44 * 10^{-13}) * \text{Exp}[1140/t[r, \phi]] ; \\
k62[r_-, \phi_-] &:= (1.77 * 10^{-11}) * \text{Exp}[178/t[r, \phi]] ; \\
k63[r_-, \phi_-] &:= (1.85 * 10^{-11}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.95}) * \text{Exp}[-8571/t[r, \phi]] ; \\
k64[r_-, \phi_-] &:= 1.10 * 10^{-10} ; \\
k65[r_-, \phi_-] &:= (3.81 * 10^{-12}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-14545/t[r, \phi]] ; \\
k66[r_-, \phi_-] &:= (4.36 * 10^{-11}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.46}) * \text{Exp}[-364/t[r, \phi]] ; \\
k67[r_-, \phi_-] &:= (6.21 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-12439/t[r, \phi]] ; \\
k68[r_-, \phi_-] &:= (7.3 * 10^{-13}) * ((t[r, \phi]/300)^{1.14}) * \text{Exp}[-3742/t[r, \phi]] ; \\
k69[r_-, \phi_-] &:= (2.51 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-38602/t[r, \phi]] ; \\
k70[r_-, \phi_-] &:= 5 * 10^{-11} ; \\
k71[r_-, \phi_-] &:= 1 * 10^{-10} ; \\
k72[r_-, \phi_-] &:= (1.18 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-20413/t[r, \phi]] ; \\
k73[r_-, \phi_-] &:= 6 * 10^{-11} ; \\
k74[r_-, \phi_-] &:= (2.94 * 10^{-12}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-3500/t[r, \phi]] ; \\
k75[r_-, \phi_-] &:= 1 * 10^{-12} ; \\
k76[r_-, \phi_-] &:= (1.74 * 10^{-11}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.67}) * \text{Exp}[-956/t[r, \phi]] ; \\
k77[r_-, \phi_-] &:= (8.25 * 10^{-11}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.17}) * \text{Exp}[254/t[r, \phi]] ; \\
k78[r_-, \phi_-] &:= 5 * 10^{-11} ; \\
k79[r_-, \phi_-] &:= (4.02 * 10^{-10}) * ((t[r, \phi]/300)^{1.43}) * \text{Exp}[-3501/t[r, \phi]] ; \\
k80[r_-, \phi_-] &:= (5.75 * 10^{-11}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.1}) * \text{Exp}[-200/t[r, \phi]] ; \\
k81[r_-, \phi_-] &:= (2.46 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-26567/t[r, \phi]] ; \\
k82[r_-, \phi_-] &:= (1.15 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-13400/t[r, \phi]] ;
\end{aligned}$$

$k83[r_-, \phi_-] := (1.66 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-14100/t[r, \phi]]$;
 $k84[r_-, \phi_-] := (2.48 * 10^{-10}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.65}) * \text{Exp}[-783/t[r, \phi]]$;
 $k85[r_-, \phi_-] := (4.68 * 10^{-11}) * ((t[r, \phi]/300)^{0.5}) * \text{Exp}[-28940/t[r, \phi]]$;
 $k86[r_-, \phi_-] := (6.5 * 10^{-12}) * \text{Exp}[120/t[r, \phi]]$;
 $k87[r_-, \phi_-] := 1 * 10^{-11}$;
 $k88[r_-, \phi_-] := 1 * 10^{-11}$;
 $k89[r_-, \phi_-] := (6.6 * 10^{-13}) * \text{Exp}[-2760/t[r, \phi]]$;
 $k90[r_-, \phi_-] := (8.3 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-5530/t[r, \phi]]$;
 $k91[r_-, \phi_-] := (1.6 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-2150/t[r, \phi]]$;
 $k92[r_-, \phi_-] := (9.01 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-9837/t[r, \phi]]$;
 $k93[r_-, \phi_-] := 1.7 * 10^{-11}$;
 $k94[r_-, \phi_-] := (1.65 * 10^{-12}) * ((t[r, \phi]/300)^{1.14}) * \text{Exp}[-50/t[r, \phi]]$;
 $k95[r_-, \phi_-] := (1 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-1000/t[r, \phi]]$;
 $k96[r_-, \phi_-] := (1.87 * 10^{-13}) * ((t[r, \phi]/300)^{1.5}) * \text{Exp}[-3887/t[r, \phi]]$;
 $k97[r_-, \phi_-] := (2.81 * 10^{-13}) * \text{Exp}[-176/t[r, \phi]]$;
 $k98[r_-, \phi_-] := 1 * 10^{-10}$;
 $k99[r_-, \phi_-] := (5.2 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-15100/t[r, \phi]]$;
 $k100[r_-, \phi_-] := (4.44 * 10^{-12}) * ((t[r, \phi]/300)^{1.37}) * \text{Exp}[169/t[r, \phi]]$;
 $k101[r_-, \phi_-] := 6.6 * 10^{-11}$;
 $k102[r_-, \phi_-] := (9.39 * 10^{-14}) * ((t[r, \phi]/300)^{1.12}) * \text{Exp}[-800/t[r, \phi]]$;
 $k103[r_-, \phi_-] := 2.10 * 10^{-12}$;
 $k104[r_-, \phi_-] := 8.6 * 10^{-11}$;

$$\begin{aligned}
k105[r_-, \phi_-] &:= 1.4 * 10^{-11} ; \\
k106[r_-, \phi_-] &:= (1.5 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{1.37}) * \text{Exp}[-4300/t[r, \phi]] ; \\
k107[r_-, \phi_-] &:= 1.6 * 10^{-13} ; \\
k108[r_-, \phi_-] &:= (1.62 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-21205/t[r, \phi]] ; \\
k109[r_-, \phi_-] &:= (5.01 * 10^{-12}) ((t[r, \phi]/300)^{0.46}) * \text{Exp}[8/t[r, \phi]] ; \\
k110[r_-, \phi_-] &:= (1.86 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.13}) * \text{Exp}[40/t[r, \phi]] ; \\
k111[r_-, \phi_-] &:= (3.93 * 10^{-12}) * \text{Exp}[199/t[r, \phi]] ; \\
k112[r_-, \phi_-] &:= (5.99 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-24075/t[r, \phi]] ; \\
k113[r_-, \phi_-] &:= (1.62 * 10^{-13}) * \text{Exp}[-8780/t[r, \phi]] ; \\
k114[r_-, \phi_-] &:= (1.48 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-17000/t[r, \phi]] ; \\
k115[r_-, \phi_-] &:= (1 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-55200/t[r, \phi]] ; \\
k116[r_-, \phi_-] &:= (1.3 * 10^{-9}) * \text{Exp}[-34513/t[r, \phi]] ; \\
k117[r_-, \phi_-] &:= (9 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{0.96}) * \text{Exp}[-28/t[r, \phi]] ; \\
k118[r_-, \phi_-] &:= (1.72 * 10^{-10}) ((t[r, \phi]/300)^{0.53}) * \text{Exp}[-17/t[r, \phi]] ; \\
k119[r_-, \phi_-] &:= (2.72 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-282/t[r, \phi]] ; \\
k120[r_-, \phi_-] &:= (2.51 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-30653/t[r, \phi]] ; \\
k121[r_-, \phi_-] &:= (7.22 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-33155/t[r, \phi]] ; \\
k122[r_-, \phi_-] &:= (2.8 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-23400/t[r, \phi]] ; \\
k123[r_-, \phi_-] &:= (1.75 * 10^{-10}) * \text{Exp}[-20200/t[r, \phi]] ; \\
k124[r_-, \phi_-] &:= (3.47 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{1.33}) * \text{Exp}[-242/t[r, \phi]] ; \\
k125[r_-, \phi_-] &:= (4.55 * 10^{-11}) ((t[r, \phi]/300)^{1.33}) * \text{Exp}[-242/t[r, \phi]] ; \\
k126[r_-, \phi_-] &:= (2.92 * 10^{-13}) ((t[r, \phi]/300)^{2.23}) * \text{Exp}[-23292/t[r, \phi]] ;
\end{aligned}$$

$$k127[r_-, \phi_-] := (4.74 * 10^{-13}) ((t[r, \phi] / 300)^{1.41}) * \text{Exp}[439 / t[r, \phi]] ;$$

$$k128[r_-, \phi_-] := 1.32 * 10^{-12} ;$$

$$k129[r_-, \phi_-] := (8.1 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-773 / t[r, \phi]] ;$$

$$k130[r_-, \phi_-] := (1.1 * 10^{-14}) ((t[r, \phi] / 300)^{1.89}) * \text{Exp}[-1538 / t[r, \phi]] ;$$

$$k131[r_-, \phi_-] := (1.73 * 10^{-11}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.5}) * \text{Exp}[-11500 / t[r, \phi]] ;$$

$$k132[r_-, \phi_-] := (9.7 * 10^{-12}) * \text{Exp}[-4545 / t[r, \phi]] ;$$

$$k133[r_-, \phi_-] := 6.9 * 10^{-11} ;$$

$$k134[r_-, \phi_-] := 1.03 * 10^{-10} ;$$

$$k135[r_-, \phi_-] := 1.62 * 10^{-11} ;$$

$$k136[r_-, \phi_-] := 1.59 * 10^{-11} ;$$

$$k137[r_-, \phi_-] := 1.03 * 10^{-11} ;$$

$$k138[r_-, \phi_-] := (5.94 * 10^{-17}) ((t[r, \phi] / 300)^{0.17}) * \text{Exp}[65.9 / t[r, \phi]] ;$$

$$k139[r_-, \phi_-] := 2.26 * 10^{-10} ;$$

$$k140[r_-, \phi_-] := (1 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-4800 / t[r, \phi]] ;$$

$$k141[r_-, \phi_-] := (1 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-4800 / t[r, \phi]] ;$$

$$k142[r_-, \phi_-] := (1 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-4800 / t[r, \phi]] ;$$

$$k143[r_-, \phi_-] := (1 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-4800 / t[r, \phi]] ;$$

$$k144[r_-, \phi_-] := (1 * 10^{-11}) * \text{Exp}[-4800 / t[r, \phi]] ;$$

APÊNDICE D

PROGRAMAÇÃO PARA A TAXA DE VARIAÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS

Como mostrado no modelo químico, a taxa de variação dos elementos químicos pode ser escrita como $k n(A) n(B)$, onde k o coeficiente de taxa e $n(A)$ e $n(B)$ são as espécies envolvidas na reação. O código para este cálculo é mostrado em seguida.

$$r1 = k1[r, \phi] * nH[r] nOH[r] ;$$

$$r2 = k2[r, \phi] * nH[r] nH2O[r] ;$$

$$r3 = k3[r, \phi] * nH[r] nHNO[r] ;$$

$$r4 = k4[r, \phi] * nH[r] nHCO[r] ;$$

$$r5 = k5[r, \phi] * nH[r] nCO[r] ;$$

$$r6 = k6[r, \phi] * nH[r] nNO[r] ;$$

$$r7 = k7[r, \phi] * nH[r] nNO[r] ;$$

$$r8 = k8[r, \phi] * nH[r] nO2[r] ;$$

$$r9 = k9[r, \phi] * nH[r] nHNO[r] ;$$

$$r10 = k10[r, \phi] * nH[r] nCO2[r] ;$$

$$r11 = k11[r, \phi] * nH[r] nN2O[r] ;$$

$$r12 = k12[r, \phi] * nH[r] nN2O[r] ;$$

$$r13 = k13[r, \phi] * nH[r] nN2O[r] ;$$

$$r14 = k14[r, \phi] * nH[r] nSO[r] ;$$

$$\begin{aligned}r_{15} &= k_{15}[r, \phi] * nH[r] nSO[r] ; \\r_{16} &= k_{16}[r, \phi] * nH[r] nOCS[r] ; \\r_{17} &= k_{17}[r, \phi] * nH_2[r] nO[r] ; \\r_{18} &= k_{18}[r, \phi] * nH_2[r] nOH[r] ; \\r_{19} &= k_{19}[r, \phi] * nH_2[r] nO_2[r] ; \\r_{20} &= k_{20}[r, \phi] * nC[r] nOH[r] ; \\r_{21} &= k_{21}[r, \phi] * nC[r] nOH[r] ; \\r_{22} &= k_{22}[r, \phi] * nC[r] nCO[r] ; \\r_{23} &= k_{23}[r, \phi] * nC[r] nHCO[r] ; \\r_{24} &= k_{24}[r, \phi] * nC[r] nNO[r] ; \\r_{25} &= k_{25}[r, \phi] * nC[r] nNO[r] ; \\r_{26} &= k_{26}[r, \phi] * nC[r] nO_2[r] ; \\r_{27} &= k_{27}[r, \phi] * nC[r] nOCN[r] ; \\r_{28} &= k_{28}[r, \phi] * nC[r] nSO[r] ; \\r_{29} &= k_{29}[r, \phi] * nC[r] nSO[r] ; \\r_{30} &= k_{30}[r, \phi] * nC[r] nSO_2[r] ; \\r_{31} &= k_{31}[r, \phi] * nCH[r] nO[r] ; \\r_{32} &= k_{32}[r, \phi] * nCH[r] nO[r] ; \\r_{33} &= k_{33}[r, \phi] * nCH[r] nOH[r] ; \\r_{34} &= k_{34}[r, \phi] * nCH[r] nNO[r] ; \\r_{35} &= k_{35}[r, \phi] * nCH[r] nNO[r] ; \\r_{36} &= k_{36}[r, \phi] * nCH[r] nNO[r] ; \\r_{37} &= k_{37}[r, \phi] * nCH[r] nNO[r] ;\end{aligned}$$

$r_{38} = k_{38}[r, \phi] * n_{CH}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{39} = k_{39}[r, \phi] * n_{CH}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{40} = k_{40}[r, \phi] * n_{CH}[r] n_{CO_2}[r]$
 $r_{41} = k_{41}[r, \phi] * n_N[r] n_{OH}[r] ;$
 $r_{42} = k_{42}[r, \phi] * n_N[r] n_{HCO}[r] ;$
 $r_{43} = k_{43}[r, \phi] * n_N[r] n_{HCO}[r] ;$
 $r_{44} = k_{44}[r, \phi] * n_N[r] n_{NO}[r] ;$
 $r_{45} = k_{45}[r, \phi] * n_N[r] n_{HNO}[r] ;$
 $r_{46} = k_{46}[r, \phi] * n_N[r] n_{HNO}[r] ;$
 $r_{47} = k_{47}[r, \phi] * n_N[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{48} = k_{48}[r, \phi] * n_N[r] n_{CO_2}[r] ;$
 $r_{49} = k_{49}[r, \phi] * n_N[r] n_{NO_2}[r] ;$
 $r_{50} = k_{50}[r, \phi] * n_N[r] n_{NO_2}[r] ;$
 $r_{51} = k_{51}[r, \phi] * n_N[r] n_{NO_2}[r] ;$
 $r_{52} = k_{52}[r, \phi] * n_N[r] n_{NO_2}[r] ;$
 $r_{53} = k_{53}[r, \phi] * n_N[r] n_{PO}[r] ;$
 $r_{54} = k_{54}[r, \phi] * n_N[r] n_{SO}[r] ;$
 $r_{55} = k_{55}[r, \phi] * n_N[r] n_{SO}[r] ;$
 $r_{56} = k_{56}[r, \phi] * n_{NH}[r] n_O[r] ;$
 $r_{57} = k_{57}[r, \phi] * n_{NH}[r] n_O[r] ;$
 $r_{58} = k_{58}[r, \phi] * n_{NH}[r] n_{OH}[r] ;$
 $r_{59} = k_{59}[r, \phi] * n_{NH}[r] n_{NO}[r] ;$

$$r60 = k60[r, \phi] * nCH[r] nNO[r] ;$$

$$r61 = k61[r, \phi] * nNH[r] nNO2[r] ;$$

$$r62 = k62[r, \phi] * nO[r] nOH[r] ;$$

$$r63 = k63[r, \phi] * nO[r] nH2O[r] ;$$

$$r64 = k64[r, \phi] * nO[r] nC2[r] ;$$

$$r65 = k65[r, \phi] * nO[r] nCN[r] ;$$

$$r66 = k66[r, \phi] * nO[r] nCN[r] ;$$

$$r67 = k67[r, \phi] * nO[r] nHCN[r] ;$$

$$r68 = k68[r, \phi] * nO[r] nHCN[r] ;$$

$$r69 = k69[r, \phi] * nO[r] nN2[r] ;$$

$$r70 = k70[r, \phi] * nO[r] nHCO[r] ;$$

$$r71 = k71[r, \phi] * nO[r] nSiH[r] ;$$

$$r72 = k72[r, \phi] * nO[r] nNO[r] ;$$

$$r73 = k73[r, \phi] * nO[r] nHNO[r] ;$$

$$r74 = k74[r, \phi] * nO[r] nHNO[r] ;$$

$$r75 = k75[r, \phi] * nO[r] nHNO[r] ;$$

$$r76 = k76[r, \phi] * nO[r] nHS[r] ;$$

$$r77 = k77[r, \phi] * nO[r] nHS[r] ;$$

$$r78 = k78[r, \phi] * nO[r] nSiC[r] ;$$

$$r79 = k79[r, \phi] * nO[r] nOCN[r] ;$$

$$r80 = k80[r, \phi] * nO[r] nSiN[r] ;$$

$$r81 = k81[r, \phi] * nO[r] nCO2[r] ;$$

$r_{82} = k_{82}[r, \phi] * nO[r] nN_2O[r] ;$
 $r_{83} = k_{83}[r, \phi] * nO[r] nN_2O[r] ;$
 $r_{84} = k_{84}[r, \phi] * nO[r] nCS[r] ;$
 $r_{85} = k_{85}[r, \phi] * nO[r] nCN[r] ;$
 $r_{86} = k_{86}[r, \phi] * nO[r] nNO_2[r] ;$
 $r_{87} = k_{87}[r, \phi] * nO[r] nNS[r] ;$
 $r_{87} = k_{87}[r, \phi] * nO[r] nNS[r] ;$
 $r_{89} = k_{89}[r, \phi] * nO[r] nSO[r] ;$
 $r_{90} = k_{90}[r, \phi] * nO[r] nOCS[r] ;$
 $r_{91} = k_{91}[r, \phi] * nO[r] nOCS[r] ;$
 $r_{92} = k_{92}[r, \phi] * nO[r] nSO_2[r] ;$
 $r_{93} = k_{93}[r, \phi] * nO[r] nS_2[r] ;$
 $r_{94} = k_{94}[r, \phi] * nOH[r] nOH[r] ;$
 $r_{95} = k_{95}[r, \phi] * nOH[r] nCN[r] ;$
 $r_{96} = k_{96}[r, \phi] * nOH[r] nHCN[r] ;$
 $r_{97} = k_{97}[r, \phi] * nOH[r] nCO[r] ;$
 $r_{98} = k_{98}[r, \phi] * nOH[r] nSi[r] ;$
 $r_{99} = k_{99}[r, \phi] * nOH[r] nNO[r] ;$
 $r_{100} = k_{100}[r, \phi] * nOH[r] nHNO[r] ;$
 $r_{101} = k_{101}[r, \phi] * nOH[r] nS[r] ;$
 $r_{102} = k_{102}[r, \phi] * nOH[r] nCS[r] ;$
 $r_{103} = k_{103}[r, \phi] * nOH[r] nSiO[r] ;$

$r_{104} = k_{104}[r, \phi] * n_{OH}[r] n_{SO}[r] ;$
 $r_{105} = k_{105}[r, \phi] * n_{H_2O}[r] n_F[r] ;$
 $r_{106} = k_{106}[r, \phi] * n_{C_2}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{107} = k_{107}[r, \phi] * n_{CN}[r] n_{NO}[r] ;$
 $r_{108} = k_{108}[r, \phi] * n_{CN}[r] n_{NO}[r] ;$
 $r_{109} = k_{109}[r, \phi] * n_{CN}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{110} = k_{110}[r, \phi] * n_{CN}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{111} = k_{111}[r, \phi] * n_{CN}[r] n_{NO_2}[r] ;$
 $r_{112} = k_{112}[r, \phi] * n_{CO}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{113} = k_{113}[r, \phi] * n_{CO}[r] n_{N_2O}[r] ;$
 $r_{114} = k_{114}[r, \phi] * n_{CO}[r] n_{NO_2}[r] ;$
 $r_{115} = k_{115}[r, \phi] * n_{N_2}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{116} = k_{116}[r, \phi] * n_{Si}[r] n_{CO}[r] ;$
 $r_{117} = k_{117}[r, \phi] * n_{Si}[r] n_{SNO}[r] ;$
 $r_{118} = k_{118}[r, \phi] * n_{Si}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{119} = k_{119}[r, \phi] * n_{Si}[r] n_{CO_2}[r] ;$
 $r_{120} = k_{120}[r, \phi] * n_{NO}[r] n_{NO}[r] ;$
 $r_{121} = k_{121}[r, \phi] * n_{NO}[r] n_{NO}[r] ;$
 $r_{122} = k_{122}[r, \phi] * n_{NO}[r] n_{O_2}[r] ;$
 $r_{123} = k_{123}[r, \phi] * n_{NO}[r] n_S[r] ;$
 $r_{124} = k_{124}[r, \phi] * n_{NO}[r] n_{OCN}[r] ;$
 $r_{125} = k_{125}[r, \phi] * n_{NO}[r] n_{OCN}[r] ;$

$$r126 = k126[r, \phi] * nNO[r] nN2O[r] ;$$

$$r127 = k127[r, \phi] * nO2[r] nS[r] ;$$

$$r128 = k128[r, \phi] * nO2[r] nOCN[r] ;$$

$$r129 = k129[r, \phi] * nO2[r] nOCN[r] ;$$

$$r130 = k130[r, \phi] * nO2[r] nOCN[r] ;$$

$$r131 = k131[r, \phi] * nS[r] nSO[r] ;$$

$$r132 = k132[r, \phi] * nS[r] nSO2[r] ;$$

$$r133 = k133[r, \phi] * nTi[r] nNO2[r] ;$$

$$r134 = k134[r, \phi] * nTi[r] nSO2[r] ;$$

$$r135 = k135[r, \phi] * nTi[r] nO2[r] ;$$

$$r136 = k136[r, \phi] * nTi[r] nNO[r] ;$$

$$r137 = k137[r, \phi] * nTi[r] nCO2[r] ;$$

$$r138 = k138[r, \phi] * nTi[r] nO[r] ;$$

$$r139 = k139[r, \phi] * nTiO[r] nC[r] ;$$

$$r140 = k140[r, \phi] * nTi[r] nCO[r] ;$$

$$r141 = k141[r, \phi] * nTi[r] nOH[r] ;$$

$$r142 = k142[r, \phi] * nTi[r] nSiO[r] ;$$

$$r143 = k143[r, \phi] * nTi[r] nH2O[r] ;$$

$$r144 = k144[r, \phi] * nTiO[r] nH2O[r] ;$$

APÊNDICE E

PROGRAMAÇÃO PARA AS EQUAÇÕES DE FORMAÇÃO E DESTRUIÇÃO DAS ESPÉCIES QUÍMICAS

Tendo em mãos as equações de reação e destruição relacionadas a cada espécie, foi possível determinar a variação total de cada substância através da equação (6). Contudo, algumas alterações foram necessárias para incluir a variação de densidade na programação. A formulação matemática realizada é descrita em seguida.

O problema pode ser interpretado da seguinte forma. À equação (5) deve ser adicionada a variação de densidade para cada variação de raio, resultando em

$$\frac{dn(AB) \text{ dens}[r, \phi]}{dr} = k n(A) \text{ dens}[r, \phi] n(B) \text{ dens}[r, \phi], \quad (19)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{\frac{dn(AB)}{dr} \times \text{dens}[r, \phi] + n(AB) \times \frac{d(\text{dens}[r, \phi])}{dr}}{\text{dens}^2[r, \phi]} = k n(A) n(B) [r, \phi], \quad (20)$$

incluindo assim as variações de densidade a cada novo raio iterado. Definindo

$$d \text{ dens}[r, \phi] = \frac{d(\text{dens}[r, \phi])}{dr}, \quad (21)$$

o código introduzido no Mathematica com as equações diferenciais é

$$\text{eqns} = \{ (\text{dldens}[r, \phi] \text{ nH}[r] + \text{nH}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r17+r18+r21+r32+r33+r37+r42+r46+r57+r59+r62+r71+r75+r77+r97+r98+r99+r101+$$

$$r102+r103+r104+r141) - (r1+r2+r3+r4+r5+r6+r7+r8+r9+r10+r11+r12+r13+r14+r15),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nOH}[r] + \text{nOH}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r2+r5+r7+r8+r9+r10+r11+r13+r14+r17+r19+r31+r35+r38+r56+r60+r61+r63+r70+r73$$

$$+r76+r105) -$$

$$(r1+r18+r20+r21+r33+r41+r42+r58+r62+r94+r95+r96+r97+r98+r99+r100+r101+r102$$

$$+r103+r104),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nO}[r] + \text{nO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r1+r6+r8+r15+r20+r22+r24+r26+r29+r34+r39+r41+r44+r47+r49+r52+r94+r95+r112+$$

$$r115+r118+r121+r122+r127+r130+r131+r135) -$$

$$(r62+r63+r64+r65+r66+r67+r68+r69+r70+r71+r72+r73+r74+r75+r76+r77+r78+r79+$$

$$r80+r81+r82+r83+r84+r85+r86+r87+r88+r89+r90+r91+r92+r93),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nH}_2[r] + \text{nH}_2'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (r1+r2+r3+r4+r143+r144) -$$

$$(r17+r18+r19),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nH}_2\text{O}[r] + \text{nH}_2\text{O}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (r18+r58+r94+r96+r100) -$$

$$(r2+r63+r105+r143),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nCO}[r] + \text{nCO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r4+r10+r16+r21+r23+r25+r26+r27+r28+r30+r32+r38+r40+r43+r48+r64+r66+r68+r70$$

$$+r81+r84+r91+r106+r107+r109+r119+r124+r125+r129+r137+r139) -$$

$$(r5+r22+r97+r112+r113+r114+r116+r140),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nC}[r] + \text{nC}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (r5+r31+r64+r65+r78+r85+r116+r140) -$$

$$(r20+r21+r22+r23+r24+r25+r26+r27+r28+r29+r30),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nHCO}[r] + \text{nHCO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (r33+r36+r39+r40) -$$

$$(r4+r23+r43+r70),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nNO}[r] + \text{nNO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r3+r12+r42+r45+r48+r50+r53+r55+r57+r65+r69+r73+r82+r87+r100+r109+r111+r114$$

$$+r128+r133) -$$

$$(r6+r7+r24+r25+r34+r35+r36+r37+r44+r59+r60+r72+r99+r107+r108+r117+r120+$$

$$r121+r122+r123+r124+r125+r126+r136),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nNH}[r] + \text{nNH}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (r6+r9+r12+r41+r43+r45+r68+r74) -$$

$$(r56+r57+r58+r59+r60+r61),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nN}[r] + \text{nN}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r7+r25+r56+r58+r66+r69+r80+r88+r108+r117+r123+r136) -$$

$$(r41+r42+r43+r44+r45+r46+r47+r48+r49+r50+r51+r52+r52+r54+r55),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nO}_2[r] + \text{nO}_2'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r51+r62+r72+r74+r79+r81+r83+r86+r89+r92+r120) -$$

$$(r8+r19+r26+r38+r39+r47+r106+r109+r110+r112+r115+r118+r122+r127+r130+r135),$$

$$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nHNO}[r] + \text{nHNO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$$

$$(r3+r9+r45+r46+r73+r74+r75+r100),$$

$(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nCO2}[r] + \text{nCO2}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r90} + \text{r97} + \text{r112} + \text{r113} + \text{r114} + \text{r128}) -$
 $(\text{r10} + \text{r40} + \text{r48} + \text{r81} + \text{r119} + \text{r137}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nN2O}[r] + \text{nN2O}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$
 $(\text{r46} + \text{r52} + \text{r59} + \text{r61} + \text{r115} + \text{r121} + \text{r124} + \text{r125}) - (\text{r11} + \text{r12} + \text{r13} + \text{r82} + \text{r83} + \text{r113} + \text{r126}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nN2}[r] + \text{nN2}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$
 $(\text{r11} + \text{r13} + \text{r44} + \text{r49} + \text{r51} + \text{r60} + \text{r83} + \text{r107} + \text{r113} + \text{r120} + \text{r126}) - (\text{r69} + \text{r115}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSO}[r] + \text{nSO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$
 $(\text{r30} + \text{r77} + \text{r85} + \text{r88} + \text{r91} + \text{r92} + \text{r93} + \text{r101} + \text{r123} + \text{r127} + \text{r132} + \text{r134}) -$
 $(\text{r14} + \text{r15} + \text{r28} + \text{r29} + \text{r54} + \text{r55} + \text{r89} + \text{r104} + \text{r130} + \text{r131}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nS}[r] + \text{nS}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r14} + \text{r28} + \text{r55} + \text{r84} + \text{r89} + \text{r93}) -$
 $(\text{r101} + \text{r123} + \text{r127} + \text{r131} + \text{r132}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nHS}[r] + \text{nHS}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r15} + \text{r16}) - (\text{r76} + \text{r77}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nOCS}[r] + \text{nOCS}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r102}) - (\text{r16} + \text{r90} + \text{r91}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nCH}[r] + \text{nCH}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r20} + \text{r23}) -$
 $(\text{r31} + \text{r32} + \text{r33} + \text{r34} + \text{r35} + \text{r36} + \text{r37} + \text{r38} + \text{r39} + \text{r40}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nC2}[r] + \text{nC2}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r22}) - (\text{r64} + \text{r106}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nCN}[r] + \text{nCN}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r24} + \text{r27} + \text{r35} + \text{r67} + \text{r79} + \text{r96}) -$
 $(\text{r65} + \text{r66} + \text{r95} + \text{r107} + \text{r108} + \text{r109} + \text{r110} + \text{r111}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nOCN}[r] + \text{nOCN}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r37} + \text{r108} + \text{r110} + \text{r111}) -$
 $(\text{r27} + \text{r79} + \text{r124} + \text{r125} + \text{r128} + \text{r129}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nCS}[r] + \text{nCS}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r29}) - (\text{r84} + \text{r85} + \text{r102}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSO2}[r] + \text{nSO2}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r104} + \text{r130}) - (\text{r30} + \text{r92} + \text{r132} + \text{r134}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nHCN}[r] + \text{nHCN}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r34} + \text{r95}) - (\text{r67} + \text{r68}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nNO2}[r] + \text{nNO2}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r75} + \text{r99} + \text{r122} + \text{r126} + \text{r129}) -$
 $(\text{r49} + \text{r50} + \text{r51} + \text{r52} + \text{r61} + \text{r86} + \text{r111} + \text{r114} + \text{r133}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nPO}[r] + \text{nPO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r53},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nP}[r] + \text{nP}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r53},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nNS}[r] + \text{nNS}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r54}) - (\text{r87} + \text{r88}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSiH}[r] + \text{nSiH}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r71},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSiO}[r] + \text{nSiO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$
 $(\text{r71} + \text{r78} + \text{r80} + \text{r98} + \text{r116} + \text{r117} + \text{r118} + \text{r119}) - (\text{r103} + \text{r142}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSiC}[r] + \text{nSiC}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r78},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSiN}[r] + \text{nSiN}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r80},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nS2}[r] + \text{nS2}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r131}) - (\text{r93}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSi}[r] + \text{nSi}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r98} + \text{r142}) - (\text{r116} + \text{r117} + \text{r118} + \text{r119}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nSiO2}[r] + \text{nSiO2}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r103},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nF}[r] + \text{nF}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r105},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nHF}[r] + \text{nHF}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == \text{r105},$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nTi}[r] + \text{nTi}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] == (\text{r139}) -$
 $(\text{r133} + \text{r134} + \text{r135} + \text{r136} + \text{r137} + \text{r138} + \text{r140} + \text{r143}),$
 $(\text{dldens}[r, \phi] \text{ nTiO}[r] + \text{nTiO}'[r]) / \text{dens}[r, \phi] ==$
 $(\text{r133} + \text{r134} + \text{r135} + \text{r136} + \text{r137} + \text{r138} + \text{r140} + \text{r141} + \text{r142} + \text{r143}) - (\text{r139} + \text{r144}) \};$

APÊNDICE F

PROGRAMAÇÃO PARA O INTEGRADOR NUMÉRICO

Por fim, o código utilizado para as condições iniciais e integrador numérico é mostrado em seguida.

```

dH2 = 5*10^-1;
ic = { nH[2] == (5*10^-1) / dH2 , nOH[2] == (4*10^-6) / dH2 , nO[2] ==
(3.42* 10^-4) / dH2 , nH2[2] == (5*10^-8) / dH2 , nH2O[2] == (7.07*10^-5) / dH2 ,
nCO[2] == (10^-4) / dH2 , nC[2] == (3.42*10^-4) / dH2 , nHCO[2] ==
(2.5*10^-8) / dH2 , nNO[2] == (3.52*10^-4 / dH2 , nNH[2] == (10^-12) / dH2 ,
nN[2] == (6.02^-5) / dH2 , nO2[2] == (3.52*10^-7) / dH2 , nHNO[2] == (10^-12) / dH2,
nCO2[2] == (2.3*10^-8) / dH2 , nN2O[2] == (10^-12) / dH2 , nN2[2] == (10^-12) / dH2
, nSO[2] == (1.8*10^-8) / dH2 , nS[2] == (1.38^-5) / dH2 , nHS[2] == (10^-12) / dH2 ,
nOCS[2] == (10^-12) / dH2 , nCH[2] == (1.7*10^-9) / dH2 , nC2[2] == (10^-12) / dH2 ,
nCN[2] == (10^-12) / dH2 , nOCN[2] == (10^-12) / dH2 , nCS[2] == (10^-12) / dH2 ,
nSO2[2] == (10^-12) / dH2 , nHCN[2] == (9.063*10^-12) / dH2 , nNO2[2] ==
(10^-12) / dH2 , nPO[2] == (10^-12) / dH2 , nP[2] == (2.29*10^-7) / dH2 , nNS[2] ==
(10^-12) / dH2 , nSiH[2] == (10^-12) / dH2 , nSiO[2] == (3.44*10^-5) / dH2 ,
nSiC[2] == (10^-12) / dH2 , nSiN[2] == (10^-12) / dH2 , nS2[2] == (10^-12) / dH2 ,
nSi[2] == (3.24*10^-5) / dH2 , nSiO2[2] == (10^-12) / dH2 , nF[2] ==
(3.6*10^-8) / dH2 , nHF[2] == (10^-12) / dH2 , nTi[2] == (7.9*10^-8) / dH2 , nTiO ==
(10^-8) / dH2 } ;

sol = Table [NDSolveValue[ { eqns , ic , WhenEvent[ t[ r , φ ] == 1200,
“StopIntegration” ] ] /. φ → φi , { nH , nOH , nO , nH2 , nH2O , nCO , nC , nHCO ,
nNO , nNH , nN , nO2 , nHNO , nCO2 , nN2O , nN2 , nSO , nS , nHS , nOCS , nCH ,
nC2 , nCN , nOCN , nCS , nSO2 , nHCN , nNO2 , nPO , nP , nNS , nSiH , nSiO ,
nSiC , nSiN , nS2 , nSi , nSiO2 , nF , nHF , nTi , nTiO } , { r , 2 , 6 } , MaxSteps →

```

Infinity , MaxStepSize $\rightarrow 0.5 \cdot 10^{-2}$, AccuracyGoal $\rightarrow 0$, PrecisionGoal $\rightarrow 0$, Method
 $\rightarrow \{\text{"BDF"}\}$] , { ϕ_i , 0 , $2 \cdot \text{Pi}$, Pi }] ;