



**Universidad
de La Laguna**

TRABAJO DE FIN DE GRADO

FACULTAD DE CIENCIAS

GRADO EN FÍSICA

**EQUATION OF STATE AND
RANKINE-HUGONIOT SHOCK
RELATIONS FOR REALISTIC DYNAMICAL
PROCESSES IN STELLAR ATMOSPHERES**

MATÍAS KOLL PISTARINI

TUTOR:

Dr. FERNANDO MORENO INSERTIS

Julio 2020

SUMMARY

The complexity of many of the processes that take place in the solar atmosphere and interior has led to the development of large, often multidimensional, numerical models to understand in detail the underlying physics. The study of phenomena from jets, surges and spicules, all the way to coronal mass ejections (CME's) or solar flares, of structures such as coronal arcs or of processes such as convection or wave propagation, requires combining aspects of hydrodynamics, electromagnetism, plasma physics and radiative transport. The development of numerical codes allows to solve in detail the equations of those fields together. One of the basic aspects of these numerical codes is the equation of state (EOS) that they implement. The EOS can be very simple, or very complex, depending on the degree of realism needed to obtain relevant results.

A code at the forefront of the study of dynamical processes in the solar atmosphere is the Bifrost code, developed at the University of Oslo. The fundamental EOS implemented in Bifrost deals with an ideal gas with ionization/recombination and molecular formation/dissociation processes; it is realistic and complex, and contains detailed microphysics. In this Graduation Thesis, we study the Bifrost EOS from a double perspective: on the one hand, we carry out a detailed characterization of the EOS, covering a large variety of aspects of the thermodynamics of partially ionized gases; on the other hand, we study the shock transitions, in particular the Hugoniot curves, allowed by the EOS. Concerning the first aspect, the motivation to carry out the characterization is that the Bifrost EOS is not well documented in the literature, which may constitute a problem for users of the code. Concerning the second, one cannot find publications that describe the general behavior of shocks calculated with this EOS. Given the ionization/recombination and molecular formation/dissociation processes taking place in the solar atmosphere and included in the EOS, this study can be important to understand the properties of shocks in the numerical models.

In the first part, the characterization of the EOS is carried out by calculating thermodynamic quantities on the basis of the tables of temperature and pressure as a function of density and internal energy obtained from the EOS. For all the numerical calculations throughout this work original Python programs have been developed independently of Bifrost's own program suite. To begin with, quantities that do not require advanced numerical methods, such as atomic mass per particle or specific heat at constant volume, are determined. Next, we calculate more advanced quantities, such as the entropy distribution, ionization or dissociation coefficients, the Chandrasekhar adiabatic coefficients, the adiabatic gradient, the specific heat ratio γ , and the speed of sound, most of which require high-order integrations or interpolations in one or two dimensions. The results are compared to those obtained for the equation of state for the simplest ideal gases, i.e., those with no changes in chemical composition, showing the importance of taking into account the ionization and molecular formation processes. In the case of entropy, the integration methods used are discussed, and the results compared with the adiabatic curves facilitated by Dr H Ludwig obtained in the context of the COBOLD code, thus verifying the validity of our results. Additionally, a detailed analytical expression for the internal energy of the gas is developed that includes all the ionization levels for Hydrogen and Helium and the formation of H_2 molecules. The obtained formula is tested by making calculations in regions where the chemical composition does not vary, obtaining an excellent fit to the general curves obtained from the Bifrost EOS table in those regions. In this way, we now have at our disposal detailed information about the ionization or molecular formation processes for H and He that take place in the different ranges of density and internal energy (or pressure and temperature) in the solar atmosphere.

In the second part of the work, the jumps of pressure, temperature and density across a shock, the corresponding increase in entropy and the incoming Mach numbers allowed by the Bifrost EOS are studied in detail. For this, the Rankine-Hugoniot jump relations are used and the corresponding Hugoniot curves are obtained, comparing the results to the well known ones for simple ideal gases. First, analytical expressions are derived for the jumps allowed when the component of the internal energy associated with ionization and molecular dissociation processes is uniform in the local thermodynamical domains where the pre-shock and post-shock states are located. This leads to unexpected results when that component has a different value before and after the shock transition. Also, an analytical expression for the derivative of post-shock pressure with respect to post-shock density along the Hugoniot curve is calculated in the general case. Then, a program is created to calculate Hugoniot and Mach number curves numerically for the general case. To illustrate the results, curves starting at pre-shock states in five regions of interest are calculated. Those curves have entry states located in regions of simple ideal gas, but are such that, along their path, cross bands of ionization or molecular dissociation. The crossing gives rise to striking consequences: the density jump can become much larger in those shocks than in the standard simple ideal gas ones; duplication in the admissible pressure and temperature jumps for a given density jump is also obtained. The temperature jump for a given pressure jump is much reduced compared to the simplest ideal gas case when the postshock state is in one of those bands, the reason being that the incoming energy in the shock may be used to ionize (or cause molecular dissociation in) the gas to a larger extent than in increasing its temperature.

Summarizing, we have derived a large number of thermodynamical and shock-related properties of the gas described by the EOS of use in the Bifrost code exclusively on the basis of the temperature and pressure maps as functions of density and internal energy. The results illuminate the behavior of the gas in various regimes of interest for the calculations in the upper solar interior, photosphere, chromosphere, transition region and corona. Particularly interesting results are obtained concerning the properties of shocks. We expect that the current results can be of use to the community using the Bifrost code in future.

Índice

1	Introducción	1
2	Objetivos	3
3	Metodología	4
4	Caracterización de la EDE de Bifrost	5
4.1	Mapas de T y p e identificación de regiones en el Sol	5
4.2	Masa atómica por partícula μ	7
4.3	Calor específico c_v	9
4.4	Entropía	10
4.4.1	Métodos de integración	11
4.4.2	Comparación con los resultados de Hans Ludwig	12
4.4.3	Comparación con el gradiente adiabático de los gases ideales simples. Segundo coeficiente adiabático de Chandrasekhar	13
4.5	Ecuación de la energía	15
4.5.1	Ecuación teórica	15
4.5.2	Comprobación de la ecuación	18
4.6	Coefficientes R y Q	19
4.7	Calor específico c_p y γ	21
4.8	Velocidad del sonido (c_s) y primer coeficiente adiabático de Chandrasekhar	22
5	Relaciones de salto de Rankine-Hugoniot: la curva de Hugoniot	23
5.1	Curvas de Hugoniot	24
5.1.1	Curva de Hugoniot para estados entrante y saliente de gas ideal simple con las mismas constantes	25
5.1.2	Curva de Hugoniot para estados entrante y saliente de gas ideal simple pero con constantes diferentes	26
5.1.3	Derivadas a lo largo de la curva de Hugoniot: caso de gas ideal general	27
5.2	Cálculo y resultados	28
5.2.1	Estado pre-choque en la región HII y HeIII	28
5.2.2	Estado pre-choque en la región HII y HeI	29
5.2.3	Estado pre-choque en la región de HI y HeI en bajas densidades	30
5.2.4	Estado pre-choque en la región de HI y HeI en altas densidades	30
5.2.5	Estado pre-choque en la región de H_2 y HeI	31
5.3	Entropía	31
6	Conclusiones	34
	Bibliografía	36

1 Introducción

In this chapter a brief justification is given of the need to develop numerical codes for the study of the solar interior and atmosphere and the importance of the Equation of State in them. It is explained what is to be studied in this work, as well as the two main parts into which it is divided: Characterization of the Bifrost EOS and the shock jump relations and Hugoniot curve derived from it

Los procesos dinámicos y radiativos que tienen lugar en las atmósferas estelares y, en particular, en la atmósfera solar presentan una alta complejidad: basta mencionar fenómenos episódicos y violentos como las eyecciones coronales de masa (CME's) o las llamaradas solares; estructuras como los arcos coronales, filamentos y protuberancias; fenómenos eyectivos como los chorros coronales y cromosféricos; o procesos como la convección o la propagación de ondas, entre muchos otros, cuya comprensión física constituye un gran reto hasta nuestros días. Para entender los fenómenos que ocurren en la atmósfera y el interior solar, es necesario combinar aspectos de hidrodinámica, electromagnetismo, física del plasma y transporte radiativo. Es por ello que la comprensión teórica de estos sistemas requiere de modelos numéricos detallados en donde se resuelvan las ecuaciones de esos campos de forma conjunta. La resolución de estas ecuaciones se tiene que realizar muchas veces en dos o tres dimensiones espaciales, debido a que muchos de esos fenómenos son intrínsecamente multidimensionales; además, muchos de estos procesos son de evolución temporal, teniendo que resolver las ecuaciones en dependencia del tiempo. Por ello, se han desarrollado en las pasadas décadas diferentes códigos numéricos multidimensionales que modelan de forma crecientemente realista estos procesos. La complejidad de estos códigos numéricos hace que su ejecución se tenga que realizar en instalaciones de supercomputación modernas masivamente paralelas.

Un elemento fundamental de estos códigos numéricos es la ecuación de estado (EDE) que implementan en función del experimento que se esté llevando cabo. La ecuación de estado proporciona una relación entre las variables que describen el estado termodinámico de un sistema bajo determinadas condiciones físicas. Existen códigos numéricos, frecuentemente llamados *idealizados*, que utilizan EDEs muy simples, como puede ser la de un gas ideal con calores específicos constantes y sin procesos de ionización/recombinación ni formación/disociación molecular. Ejemplos de este tipo son los códigos descritos o usados en los artículos de [Nordlund & Galsgaard \(2007\)](#); [Fan & Gibson \(2003\)](#); [DeVore & Antiochos \(2008\)](#); [Arber et al. \(2012\)](#). Otros códigos implementan EDEs más realistas ([Nordlund et al., 2009](#); [Freytag et al., 2012](#); [Vögler, 2003](#); [Gudiksen et al., 2011](#); [Khomenko et al., 2018](#)); este mayor realismo en la EDE se logra teniendo en cuenta una composición química compleja que incluya diferentes especies atómicas con diferentes niveles de ionización así como especies moleculares e incorporando la posibilidad de que los elementos se ionicen/recombinen o que las moléculas se formen o disocien a lo largo de la evolución del sistema.

Uno de los códigos numéricos realistas más avanzados hoy en día es el código Bifrost ([Gudiksen et al., 2011](#)). Ha sido diseñado para modelar procesos que tienen lugar en un dominio desde varios miles de km por debajo de la superficie solar hasta la corona pasando por fotosfera y cromosfera, de forma que se pueda comprender en detalle los procesos físicos que tienen lugar. Esto hace que se requiera una alta resolución espacial con respecto a las escalas características de los fenómenos atmosféricos, intentando que el coste en tiempo computacional sea lo menor posible. Bifrost se ha desarrollado con un alto grado de modularidad, estando uno de estos módulos dedicado a la EDE. La ecuación de estado considerada puede ser desde una de gas ideal simple, hasta una muy compleja que incorpore microfísica muy detallada. Actualmente se tienen tres modelos distintos de EDE, uno para un gas ideal simple y los otros basados en tablas de modelos atmosféricos generadas en función del tipo espectral y composición química de la estrella a considerar (el Sol en la mayoría de aplicaciones de

Bifrost hasta ahora). Excepto para el gas ideal simple, en los demás casos se utiliza una EDE de gas ideal con información de las abundancias y de los niveles de ionización y disociación molecular de la especies presentes en la atmósfera solar, asumiendo ETL (equilibrio termodinámico local). El fichero de entrada de la EDE proporciona tablas de temperatura, presión y densidad de electrones en función de la densidad de masa y la energía interna por unidad de masa. Esta EDE fue desarrollada por Gustafsson y colaboradores en los años 70 del siglo pasado. (Gustafsson et al., 1975). Un problema que se encuentran los usuarios externos del código Bifrost es que la EDE de Gustafsson está poco documentada en la literatura. El artículo original de Gustafsson se dedica fundamentalmente a estudiar la composición química en estrellas de tipo solar, desarrollando un modelo de atmósfera consistente con los modelos empíricos. En artículos posteriores se explican pocos detalles de la ecuación de estado. Es de interés, por tanto, utilizar las tablas de EDE usadas por el código Bifrost e intentar entender *a posteriori* las propiedades termodinámicas generales del gas o plasma descrito por ellas.

En la primera parte de este trabajo se va a llevar a cabo una caracterización de la EDE que utiliza Bifrost, particularizando al caso de la atmósfera solar. A partir de las tablas de presión y temperatura, y utilizando relaciones termodinámicas para gases ideales bajo procesos de ionización/recombinación y formación/disociación molecular, es posible obtener gran cantidad de información del medio, como los calores específicos a volumen y presión constante, coeficientes equivalentes a los de Chandrasekhar asociados a la ionización parcial, la entropía o la velocidad del sonido entre otros aspectos. Realizar estos cálculos requerirá de métodos numéricos como derivaciones, integraciones o interpolaciones.

En la segunda parte del trabajo, sobre la base de lo obtenido en la primera, se plantea estudiar los aspectos termodinámicos que vienen determinados por la ecuación de estado en la transición a través de un frente de choque. La propagación de ondas es un fenómeno presente en todas partes en el interior y atmósfera solares. En la atmósfera solar, en particular, las ondas dan lugar a la formación de choques. Debido a las temperaturas bajas (en términos relativos) y, por tanto, baja velocidad del sonido y elevada estratificación, la formación de choques es especialmente importante en la parte inferior de la atmósfera (alta fotosfera, cromosfera y región de transición). Estos choques son superficies que atraviesa el gas en su movimiento y tales que su velocidad y propiedades termodinámicas cambian bruscamente a su paso. A pesar de estos saltos en las cantidades termodinámicas, se deben cumplir estrictamente las leyes de conservación de masa, impulso y energía en la transición. Las leyes de conservación para el caso particular de los choques dan lugar a las llamadas **relaciones de salto de Rankine-Hugoniot (RH)**. A partir de esas relaciones se obtiene la denominada **curva de Hugoniot**, una curva que contiene los posibles valores de presión y densidad que puede adoptar el gas tras el choque. En el caso del gas ideal simple sin procesos de ionización/recombinación y formación/disociación molecular, el estudio de los choques está muy desarrollado, obteniéndose ecuaciones analíticas que describen el efecto de los mismos. Cuando se considera el caso mucho más general de la EDE de Bifrost, no se tendrá ecuaciones analíticas que describan el efecto de los choques en regiones con cambios en la composición química del gas, desconociéndose, por tanto, la forma que adoptará la curva de Hugoniot. Un caso claro en que esto es importante son los estudios recientes de la baja atmósfera solar (por ejemplo, la cromosfera) en que se han obtenido choques (ver, por ejemplo, Heggland et al., 2007, 2011; Takasao et al., 2013; Nóbrega-Siverio et al., 2016, 2020). A pesar del interés de este problema, no conocemos ningún estudio en que se describa la relación general esperable entre cantidades antes y después del choque predicha por esta EDE para el caso de que al paso del choque se produzcan fenómenos de ionización o disociación molecular.

2 Objetivos

The basic scientific objectives for this work are explained, namely a characterization of different thermodynamical properties of the Bifrost EDE and a study of the Hugoniot curves and other properties of the shock transitions it allows. The associated, specific learning and training targets are also listed.

En este trabajo nos planteamos fundamentalmente dos objetivos:

- Realizar una caracterización de la ecuación de estado utilizada por el código Bifrost. Este objetivo es doble: por una parte, familiarizarse con el uso de ecuaciones de estado tal como las que usan los códigos numéricos actuales; por otra, entender los diferentes regímenes que incluye en su dominio de presión y temperatura en términos del estado atómico/molecular del Hidrógeno y de los estados de ionización del Hidrógeno y el Helio en la misma. A partir de las tablas originales, usando y desarrollando expresiones generales de termodinámica que tienen en cuenta procesos de ionización/recombinación y formación/disociación molecular, se pretende determinar diversas cantidades termodinámicas, tales como coeficientes de ionización parcial, calores específicos, velocidad del sonido, coeficientes de Chandrasekhar, entropía, papel de la energía de ionización/recombinación o formación/disociación molecular en la energía interna, etc. De esa forma, se pretende obtener datos útiles para juzgar el papel de los procesos de ionización/recombinación y disociación/formación molecular en la estructura y propiedades de diferentes zonas de la atmósfera y parte superior del interior solar a los que se está aplicando esta EDE en trabajos de investigación. Como parte de este objetivo, se desarrollan programas Python para poder realizar los cálculos necesarios entre las cantidades termodinámicas por medio de métodos numéricos.
- Realizar un estudio de la curva de Hugoniot asociada a las relaciones de salto de Rankine-Hugoniot para choques en varias regiones de presión y temperatura cubiertas por la EDE de Bifrost. Este es el objetivo principal de este trabajo. Existirán zonas en las que el comportamiento de los choques será próximo al del caso del gas ideal simple, pudiéndose por tanto comparar los resultados con expresiones analíticas conocidas. En regiones en las que ocurran procesos de ionización/recombinación y formación/disociación molecular, en cambio, no se puede tener una expectativa previa clara del comportamiento de la curva de Hugoniot, ya que no se tienen expresiones analíticas que describan tales efectos, siendo esperable que hayan desviaciones importantes respecto del caso del gas ideal simple. Los cálculos a realizar cubren regímenes de presión y temperatura de interés para la atmósfera solar.

A nivel de aprendizaje a lo largo del desarrollo de este trabajo, los objetivos planteados son esencialmente:

- Aprendizaje de técnicas numéricas y de programación en Python para lectura, procesado y visualización de las cantidades asociadas a una EDE con un alto grado de realismo.
- Profundización en los conocimientos de termodinámica, desarrollando un formalismo general para tratar problemas más complejos que los tratados en los cursos elementales de termodinámica. Esta generalidad permite abordar situaciones más realistas que involucran procesos de ionización/recombinación o disociación/asociación molecular, permitiendo realizar una caracterización más completa de la EDE.
- Comprensión más avanzada y generalizada de la teoría de choques, aplicando los resultados teóricos conocidos al caso de la EDE de Bifrost, ampliando los resultados del caso del gas ideal simple estudiados en el curso de Dinámica de Fluidos del Grado a un caso más general. Este estudio permitirá experimentar de forma directa con la determinación numérica de las relaciones de salto en un contexto sin soluciones analíticas.

3 Metodología

This chapter discusses the methodology used to achieve the proposed objectives. Both in the characterization and in the study of the shocks in this EOS, high order numerical methods have been used to make the necessary calculations, comparing the results with those obtained for the simplest ideal gas case and evaluating the importance of the processes that involve changes in the chemical composition.

Para obtener los objetivos planteados en este trabajo se utilizaron los siguientes métodos:

- **Lectura de datos:** la EDE utilizada en el código Bifrost se carga en forma de mapas bidimensionales, por ejemplo de temperatura, T y presión p , como función de las variables termodinámicas densidad de masa, ρ y energía interna por unidad de masa, ε . La lectura de datos, así como el resto de la programación para los cálculos numéricos y las representaciones de los resultados en este Trabajo de Fin de Grado, fueron realizados creando programas en el lenguaje Python. Las tablas originales tienen una dimensión de 5000×5000 puntos, lo cual es exigente a la hora de realizar mapas de color y fuerza a representarlos como imágenes. Al principio del trabajo constatamos que la tabla tenía pequeños efectos de borde, de modo que en lo que sigue se ha utilizado la dimensión original salvo un pequeño recorte cercano a los márgenes de la tabla para descartar resultados no reales, sobre todo en el cálculo de derivadas.
- **Cálculo de cantidades termodinámicas a partir de los datos originales:** calcular las cantidades derivadas en la primera parte de este trabajo requiere del uso de técnicas numéricas como derivadas, interpolaciones y cuadraturas de alto orden. El cómputo de las derivadas se ha realizado por medio de diferencias finitas centradas de segundo orden, siendo este método el utilizado a lo largo de todo el trabajo. Para el caso de las integraciones numéricas, se han empleado métodos de alto orden de precisión mediante fórmulas de tipo extendido cerrado que se detallan en la [Sección 4](#). Las interpolaciones se han llevado a cabo tanto en una como en dos dimensiones utilizando métodos de splines implementados en Python, cuyo orden de interpolación dependerá del problema planteado.
- **Análisis teórico-numérico de las propiedades de la EDE:** la caracterización de la EDE de Bifrost se ha llevado a cabo calculando variables termodinámicas características como calores específicos, entropía, energías de ionización/recombinación y formación/disociación molecular frente a la energía interna total, coeficientes de ionización R y Q junto con el gradiente adiabático ∇_{ad} , y su relación con los coeficientes de Chandrasekhar, o la velocidad del sonido. En todo caso, se compara lo obtenido con los valores correspondientes al caso de gas ideal simple de calores específicos constantes. Las variables termodinámicas se obtienen a partir de las expresiones generales del primer y segundo principio de la termodinámica en el caso general de gases con composición química variable, en el sentido de admitir procesos de ionización/recombinación y formación/disociación molecular.
- **Cálculo teórico-numérico de curvas de Hugoniot para choques admisibles en la EDE de Bifrost:** las relaciones de salto usuales para el gas ideal simple dan lugar a una única curva de Hugoniot que tiene la forma de una hipérbola equilátera. Para el caso general de la EDE de Bifrost esto no ocurre: hay que calcular los valores post-choque de energía interna, densidad y presión gaseosa con métodos numéricos. Por tanto, en la [Sección 5](#) primero se obtienen expresiones teóricas más generales que las del caso del gas ideal simple que tienen en cuenta posibles diferencias en las energías de ionización y disociación molecular de los estados

de entrada y salida del choque. Después, se construye un programa que calcula numéricamente los ceros de una función que mide la diferencia entre la presión genérica del gas ideal del estado saliente y la presión forzada por las leyes de conservación impuestas mediante las relaciones RH. Esta determinación de ceros resulta ser un problema delicado por la aparición de duplicidades en el resultado, dando lugar a que, en algunos rangos admisibles de los valores pre-choque, se obtenga más de un estado de presión y temperatura a la salida para el mismo valor de densidad post-choque. Dichas duplicidades son posibles desde el punto de vista físico y pueden darse en los choques de la atmósfera solar, siendo este uno de los resultados más llamativos del presente trabajo. Estos resultados se compararán con los obtenidos por medio de las ecuaciones teóricas.

4 Caracterización de la EDE de Bifrost

In this chapter the temperature and pressure tables of the Bifrost EOS are presented. From them, thermodynamic quantities such as specific heat, molar mass, entropy, ionization coefficients, specific heat ratio or sound velocity are calculated to perform a complete characterization of the EOS, thus acquiring, among other things, familiarity with the ionization degree of H and He (or the molecular state of H), in the different regions of the solar atmosphere. In addition, a comparison is made with the results obtained from the simplest ideal gas case, in this way determining the importance of the ionization/recombination and molecular formation/dissociation processes in the density and energy ranges of Bifrost. The analytical expression for the component of the internal energy associated with ionization/recombination or molecule formation/dissociation is calculated and tested with the actual Bifrost EDE results

En esta sección se realiza una caracterización detallada de la EDE de Bifrost, determinando, mediante métodos numéricos, diferentes variables a partir de las tablas originales de temperatura y presión, y comparando los resultados con los correspondientes para el caso simple de un gas ideal de composición fija y calores específicos constantes.

4.1 Mapas de T y p e identificación de regiones en el Sol

En esta sección se presentan los resultados de la lectura de las tablas originales de la EDE de Bifrost. En la [Figura 4.1](#) se pueden ver los mapas de temperatura, T , y presión, p , en función de energía interna por unidad de masa, ε y densidad de masa ρ , que son las variables termodinámicas independientes que utiliza esta EDE. Vemos que la tabla abarca un amplio rango de valores de densidad y energía interna, que cubren la atmósfera y parte del interior solar. Para concretar esto último, se ha superpuesto a los mapas de T y p curvas procedentes de un modelo numérico 3D que se explican al final de esta subsección.

Para entender los mapas de T y p de la tabla, hay que mencionar que la EDE de Bifrost es una ecuación de estado para gases ideales, que considera procesos de ionización/recombinación y formación/disociación molecular. Presión, densidad y temperatura están relacionadas por la ecuación clásica

$$p = \frac{R_{gas}}{\mu} \rho T, \quad (1)$$

con R_{gas} la constante de los gases ideales y μ la masa molar (o masa atómica por partícula). La energía interna por unidad de masa dada en la tabla de Bifrost contiene un término de agitación térmica y otro de energías de ionización o disociación molecular, como se discute en detalle en la [Sección 4.5](#). Para una primera comparación con los valores de la tabla, recordemos el valor que se usa en el caso del gas ideal simple sin procesos de ionización ni disociación molecular, que corresponde exclusivamente a la energía de agitación térmica:

$$\varepsilon(\text{gas ideal simple}) = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho} = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{R_{\text{gas}}}{\mu} T, \quad (2)$$

con $\gamma = c_p/c_v$ y μ constantes. Si la temperatura fuese proporcional a la energía interna, como predice la ecuación (2), la [Figura 4.1](#) (izquierda) estaría formada por bandas verticales. Esto solo se aprecia a altas energías, mientras que a bajas se tienen isolíneas de temperatura inclinadas en ciertos rangos de energías. De esta forma, se tiene un primer signo de la presencia de procesos de ionización/recombinación o formación/disociación molecular. Correspondientemente, esa misma ecuación predice que $\log p$ es básicamente la suma de $\log \varepsilon$ y $\log \rho$ salvo constante. En tal caso deberíamos ver bandas de color inclinadas de igual pendiente en el mapa de presión: las desviaciones que se aprecian son debidas, de nuevo, a procesos de cambio de composición.

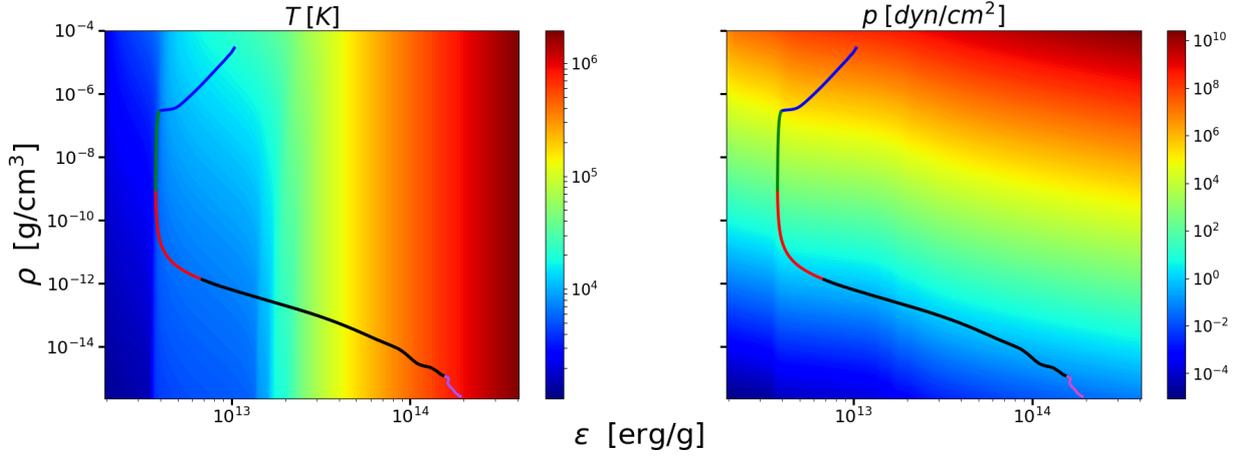


Figura 4.1: Mapas de temperatura y presión obtenidos tras lectura del fichero original de la EDE de Bifrost. Las curvas superpuestas corresponden a un modelo solar ilustrado en la [Figura 4.2](#) y explicado en el texto. Los colores en las curvas distinguen diferentes capas de la atmósfera y del interior solar: interior solar (azul), fotosfera (verde), cromosfera (rojo), región de transición (negro) y corona solar (violeta).

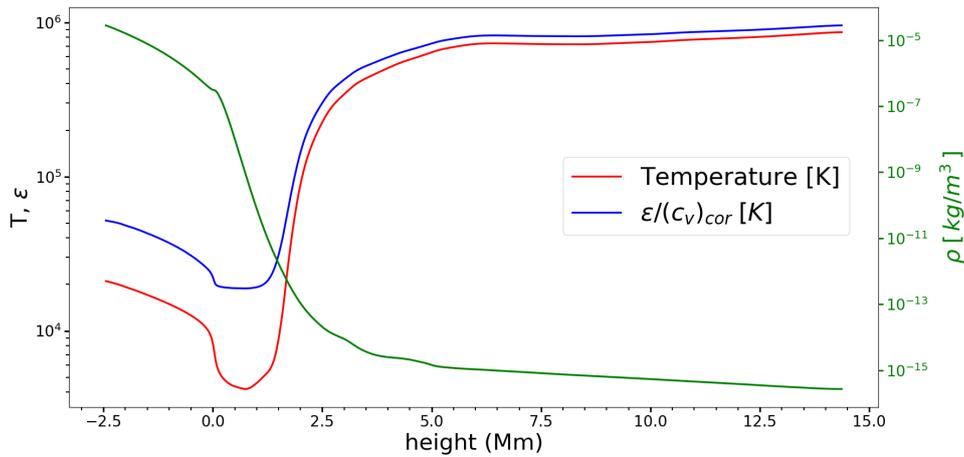


Figura 4.2: Perfiles promedio horizontal de T , ρ y ε en el modelo tridimensional publicado por [Carlsson et al. \(2016\)](#). ε se ha escalado al valor fijo $(c_v)_{\text{cor}} = R_{\text{gas}}/\mu_{\text{cor}}/(\gamma - 1) = 2.0 \cdot 10^8 \text{ erg g}^{-1} \text{ K}^{-1}$, con $\gamma = 5/3$ y $\mu_{\text{cor}} = 0.61 \text{ g mol}^{-1}$ (ver [Sección 4.3](#)).

Las curvas superpuestas a los mapas de T y p en la [Figura 4.1](#) proceden de un cálculo realizado por el Prof. Moreno-Insertis a partir de una caja tridimensional de datos correspondiente a un instante avanzado del modelo numérico de Bifrost publicado por [Carlsson et al. \(2016\)](#). En la [Figura 4.2](#) se muestran los resultados de dicho cálculo: las curvas contienen promedios horizontales de las variables T , ε y ρ en función de la altura. Por referencia para el resto del trabajo, distinguimos en dichas curvas (y en su transposición a los mapas de color de la [Figura 4.1](#)) diferentes regiones en el Sol: primero (lado izquierdo en la [Figura 4.2](#) y parte superior en [Figura 4.1](#)) los últimos varios Megámetros del interior solar, en que la temperatura disminuye hasta unos 6000 K; después, la fotosfera solar (6000 – 4000 K); por encima del mínimo de temperatura encontramos la cromosfera, en que la temperatura comienza a aumentar con la altura, hasta rebasar los 10^4 K; por encima, la región de transición, que es la zona con un aumento de temperatura pronunciado, hasta alcanzar varias veces 10^5 K; por último la corona solar ($T \gtrsim 10^6$ K), que es la capa más externa de la atmósfera solar. A medida que nos alejamos de la superficie solar, la densidad disminuye. Los tramos de colores en las curvas superpuestas a los mapas de temperatura y presión ([Figura 4.1](#)) representan cada una de estas regiones. Se ha determinado como régimen coronal en el modelo 3D de Bifrost a la región por encima de $7 \cdot 10^5$ K, ya que a partir de este valor el perfil de temperatura primero disminuye su pendiente y luego se vuelve prácticamente horizontal.

4.2 Masa atómica por partícula μ

Como primera cantidad termodinámica derivada en este trabajo, hemos determinado la masa atómica por partícula μ , también conocida como masa molar por sus unidades. El mapa de μ presentado en la [Figura 4.3](#) se ha obtenido directamente a partir de ρ , T y p usando la relación válida para un gas ideal general, ecuación (1). Para entender las diferentes zonas y valores contenidos en la figura hay que tener en cuenta que, al tratarse de un gas ideal, también se cumple:

$$p = n k_B T, \quad (3)$$

con n el número total de partículas por unidad de volumen y k_B la constante de Boltzmann. El siguiente paso es utilizar una ecuación que proporcione μ en términos del número de partículas y de las masas atómicas de las especies presentes. La composición química de la atmósfera solar con la que trabaja la EDE de Bifrost contiene una gran cantidad de elementos químicos (principalmente Hidrógeno y Helio), con masas atómicas y abundancias en número de átomos como se muestran en la [Tabla 4.1a](#). De acuerdo con la práctica común en astrofísica, las abundancias se dan en forma logarítmica y en términos relativos a la del Hidrógeno, dándole a ésta arbitrariamente el valor 12, esto es, para el elemento i -ésimo, $A_i = n_i^{tot}/n_H^{tot}$, con n_i^{tot} el número total de átomos de dicho elemento en cualquier forma (neutros, iones o moléculas); el número en la tabla es $12 + \log_{10} A_i$. Para el Hidrógeno y Helio, en particular, se contemplan todos sus estados posibles de ionización, indicados como HI, HII para el Hidrógeno neutro e ionizado, respectivamente, y como HeI, HeII y HeIII para los estados posibles del Helio. Además, se incluye el estado molecular del H, H_2 . Igualando las ecuaciones (3) y (1) y desarrollando, se llega con facilidad a:

$$\mu = \frac{\sum_i n_i a_i}{\sum_i n_i + n_e}, \quad (4)$$

donde la suma en i se extiende a todas las moléculas, átomos e iones presentes; n_i es la densidad de número de cada especie atómica, iónica o molecular por separado; a_i es la masa atómica correspondiente y n_e el número de electrones. Para el caso del H molecular, la masa atómica es el doble que la de un Hidrógeno neutro o iónico. Por medio de esta expresión se pueden determinar valores de μ en

distintas regiones de la atmósfera solar en función del estado de ionización y molecular.

En la [Figura 4.3](#) se representan los valores de μ calculados para la EDE de Bifrost para una colección de valores de la densidad. Vemos que las curvas contienen *mesetas* en determinados rangos de temperatura en que parece que la composición se mantiene fija, junto con zonas en que la composición varía. Hemos comprobado que las mesetas corresponden, efectivamente, a zonas en que las especies están o totalmente ionizadas (primer o, caso del He, posible segundo nivel de ionización), o totalmente en estado atómico, o totalmente en estado molecular para el caso del Hidrógeno. Para concluir, hemos calculado los valores teóricos de μ cuando la población de H está totalmente ionizada o totalmente en estado atómico o totalmente en estado molecular, y el He está totalmente en estado atómico, o totalmente en su primer o segundo nivel de ionización. resultado, para las combinaciones relevantes, se puede ver en la [Tabla 4.1b](#), y se representan también como rectas horizontales en la [Figura 4.3](#). Vemos que el acuerdo entre las *mesetas* y el cálculo teórico es excelente, aunque los valores no coincidan exactamente con los de la figura. Esto se debe a que en el cálculo teórico se ha tenido en cuenta únicamente H y He, mientras que en la EDE de Bifrost sí están contenidos el resto de elementos más pesados.

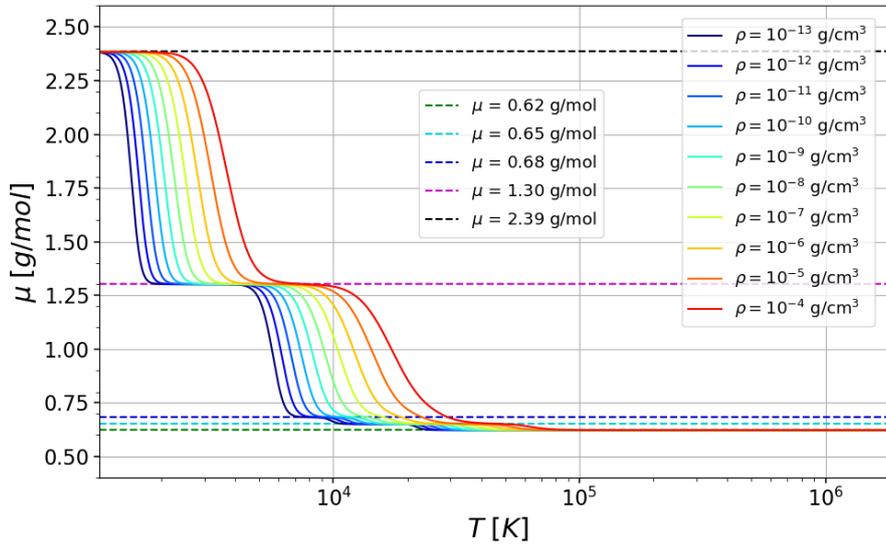


Figura 4.3: Masa atómica por partícula para distintos valores de densidades, comparando con los resultados obtenidos para situaciones con composición química constante.

Analizando los resultados en detalle, vemos que se diferencian 5 etapas en las que μ se mantiene constante. A medida que se aumenta la densidad (curvas más rojas), estas líneas horizontales dejan de aparecer, debido a que se están superponiendo las ionizaciones/recombinaciones de un elemento con las de otro en el mismo rango de temperatura. El primer gran cambio que se tiene es el causado por la disociación de moléculas de H_2 , que ocurre para valores de la temperatura comprendidos entre $2-5 \cdot 10^3$ K, dando lugar a un importante cambio en el número de partículas. A continuación, en el rango de temperatura entre $6 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^4$ K, se puede observar la ionización del H, cuya variación también es de importancia. Los posteriores cambios, a mayores temperaturas, son producidos por las dos ionizaciones/recombinaciones del He, pero su importancia en la variación de μ es significativamente menor a los anteriores, ya que este elemento presenta una abundancia de número diez veces inferior a la del H.

Elemento	Masa atómica a_i g mol ⁻¹	Abundancia (12 + log ₁₀ A_i)	Estado	μ [g mol ⁻¹]
H	1.01	12.00		
He	4.00	11.00		
C	12.01	8.55		
N	14.01	7.93		
O	16.00	8.77		
Ne	20.18	8.51	H_2 y HeI	2.33
Na	23.00	6.18	HI y HeI	1.27
Mg	24.32	7.48	III y HeI	0.67
Al	26.97	6.40	III y HeII	0.64
Si	28.06	7.55	III y HeIII	0.61
S	32.06	7.21		
K	39.10	5.05		
Ca	40.08	6.33		
Cr	52.01	5.47		
Fe	55.85	7.50		
Ni	58.69	5.08		

(a) Elementos químicos contenidos en la EDE de Bifrost junto con la masa molar (o masa atómica) y las abundancias de número de átomos correspondientes.

(b) Resultados para el μ teórico en distintos estados de ionización presentes en la EDE de Bifrost teniendo en cuenta unicamente H y He.

Tabla 4.1: Tablas de abundancias y μ .

4.3 Calor específico c_v

A continuación determinamos el calor específico a volumen constante c_v . Esta cantidad se define como el cambio necesario en la energía interna para aumentar la temperatura en una unidad en una transformación a volumen (o, con más precisión, a densidad) constante. c_v se puede expresar por tanto como:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \varepsilon}\right)_\rho = \frac{1}{c_v}, \quad (5)$$

en donde tanto c_v como ε se entienden como cantidades por unidad de masa. En el caso del gas ideal más simple, con estados iónicos y/o moleculares fijos, esta cantidad vale:

$$c_v(\text{gas ideal simple}) = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{R_{gas}}{\mu}, \quad (6)$$

con μ y γ constantes. Como referencia, en el caso coronal estándar en que el H y el He están totalmente ionizados, $\gamma = 5/3$ y $\mu = 0.61$ g mol⁻¹, se tiene $c_v = 2.0 \cdot 10^8$ erg g⁻¹ K⁻¹, siendo este valor el utilizado como factor de escala en la [Figura 4.2](#) para expresar la energía en términos de temperatura. El cálculo de la derivada (5) para el caso general de la EDE de Bifrost, se ha hecho numéricamente por medio de diferencias finitas centradas de segundo orden tomando los puntos vecinos a derecha e izquierda. Los resultados se representan con respecto de la temperatura ([Figura 4.4](#)), para distintos valores de densidad que abarcan un intervalo de 9 órdenes de magnitud. Aunque la variable primaria independiente de esta EDE es la energía interna por unidad de masa ε , aquí la mostramos en términos de la temperatura para facilitar la comprensión de los procesos que tienen lugar.

Se puede ver que esta cantidad presenta grandes variaciones hasta temperaturas por debajo de 10^5 K aproximadamente, mientras que en el rango de altas temperaturas tiende a una constante. La

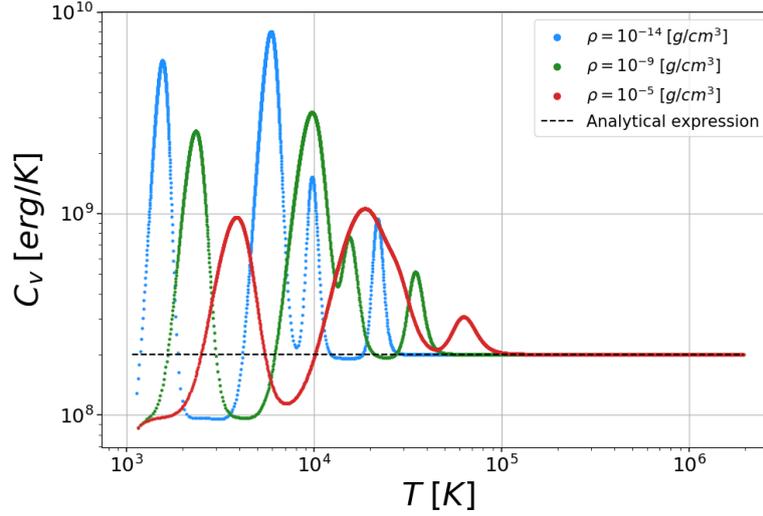


Figura 4.4: Calor específico c_v en distintos rangos de densidades, comparando con los resultados dados por la ecuación analítica del gas ideal simple con $\gamma = 5/3$ y $\mu = 0.61 \text{ g mol}^{-1}$.

constante coincide con el valor coronal deducido anteriormente para el caso del gas ideal simple con ionización total de H y He, representado en la [Figura 4.4](#) con una línea negra a trazos. Es interesante darse cuenta de que la tendencia al valor constante se produce para todos los valores de densidades estudiados. Se pueden ver otros rangos de temperatura con perfil plano de c_v , como el comprendido entre 2000 y 4000 K para el caso de $\rho = 10^{-14} \text{ g cm}^{-3}$ (curva azul): el valor de c_v ahí tiende a ser constante, ajustándose al resultado dado por la ecuación (6) para el valor de μ correspondiente. Este rango de temperaturas es el mismo que se observó en la [Figura 4.3](#) para el caso de H y He neutro.

En la región de bajas temperaturas, la energía necesaria para aumentar una unidad de temperatura llega a crecer en más de un orden de magnitud. Esta situación se puede entender en términos de cambios de estado: si se aumenta o disminuye la energía interna del sistema esta variación se invierte casi toda en cambiar su estado de ionización o de asociación molecular, mientras que la temperatura prácticamente no cambia. Trasladando esta idea a las curvas de la [Figura 4.4](#), se puede intentar identificar los procesos de ionización y recombinación o asociación y disociación molecular concretos que dan lugar a los diferentes picos. Centrándonos en la curva azul (para $\rho = 10^{-14} \text{ g cm}^{-3}$), vemos cuatro picos que, de izquierda a derecha, corresponden a los rangos de temperatura en que (a) se forma/disocia la molécula de H (primer pico de la izquierda); (b) se ioniza o recombina el H atómico (pico central y más pronunciado); (c) primera ionización del He (tercer pico desde la izquierda); (d) segunda ionización del He (último pico, que es el más pequeño). En las otras curvas se pueden detectar también los cuatro picos, aunque algunos de ellos se superponen en parte (por ejemplo en la curva roja, para $\rho = 10^{-5} \text{ g cm}^{-3}$). La formación/disociación de H molecular y la ionización/recombinación del H atómico son, sin duda, los cambios más drásticos en el calor específico, al ser el H el elemento más abundante.

4.4 Entropía

La entropía es una cantidad fundamental a la hora de analizar tanto la estructura como la evolución dinámica de los interiores y atmósferas estelares. Al ser una función de estado, es posible, teóricamente al menos, calcularla a partir de los valores de ρ y ε , usando la función termodinámica $s(\rho, \varepsilon)$. Para ver si también es factible hacerlo numéricamente, basta recordar el valor de sus derivadas parciales; usando la entropía por unidad de masa, s , se tiene:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial \varepsilon}\right)_\rho = \frac{1}{T} \quad ; \quad \left(\frac{\partial s}{\partial \rho}\right)_\varepsilon = -\frac{P}{\rho^2 T}, \quad (7)$$

que se pueden escribir en la forma sencilla de relación entre diferenciales en que se suele escribir la combinación del primer y segundo principio de la termodinámica:

$$d\varepsilon = T ds + \frac{p}{\rho} d \log \rho. \quad (8)$$

Para poder calcular la entropía, por tanto, será necesario realizar una integración numérica en ρ y ε de los miembros de la derecha en (7) usando los mapas de temperatura y presión originales. Este cálculo se ha realizado por dos métodos que se van a discutir a continuación. Cabe destacar que las ecuaciones (7) o (8) no proporcionan valores absolutos de la entropía, sino incrementos de la misma respecto de un punto fijo en el plano (ρ, ε) .

4.4.1 Métodos de integración

Los métodos de integración numérica que se han aplicado son métodos compuestos, esto es, tienen en cuenta todos los valores de la integral calculados previamente en cada paso para calcular el siguiente valor. Estos métodos exigen una distribución equiespaciada de los datos. Aprovechamos el hecho de que la tabla original de Bifrost está equiespaciada respecto a los logaritmos de ρ y ε y por tanto, realizaremos la integración respecto de dichos logaritmos. Viendo la expresión de las derivadas (7), y comprobando los valores de ε/T y R_{gas}/μ en la EDE, nos damos cuenta, además, de que las derivadas respecto de los logaritmos van a estar dentro del mismo orden de magnitud en toda la tabla

4.4.1.1 Regla trapezoidal

Como primera aproximación se utilizó la regla trapezoidal. Se trata de un método de orden 2, que aproxima la integral por medio de segmentos formados por dos puntos consecutivos del valor de la función, de manera que la integral sea el área encerrada bajo el trapecio formado. La expresión usada tiene la forma:

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x) dx = h \left[\frac{1}{2} f_1 + f_2 + f_3 + \dots + f_{N-1} + \frac{1}{2} f_N \right] + O\left(\frac{(b-a)^3 f''}{N^2}\right). \quad (9)$$

4.4.1.2 Regla de integración de orden 4

Inicialmente se pretendía realizar el cálculo de la integral por medio de la regla de Simpson 1/3. Este es un método de integración de orden 4, pero presenta el inconveniente de que se aplica a intervalos no correlativos, provocando que el número de puntos en los que se evaluará la integral sea la mitad del número inicial de puntos que se tenían muestreados. Es posible hacer una extensión de este método para los puntos intermedios, pero esta extensión sería de segundo orden de aproximación; en lugar de hacer esto, se ha realizado la integral por medio de la siguiente expresión de orden 4 (Press et al., 1992, cap. 4):

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x) dx = h \left[\frac{3}{8} f_1 + \frac{7}{6} f_2 + \frac{23}{24} f_3 + f_4 + f_5 + \dots \right. \\ \left. \dots + f_{N-4} + f_{N-3} + \frac{23}{24} f_{N-2} + \frac{7}{6} f_{N-1} + \frac{3}{8} f_N \right] + O\left(\frac{1}{N^4}\right). \quad (10)$$

Este método necesita como mínimo 6 puntos iniciales sobre los que evaluar la integral. Para los 5 primeros puntos, se han aplicado las reglas del trapecio y de Simpson, según convenga para tener una estimación en estos puntos. Dado que la tabla tiene un número elevado de puntos (5000×5000), cabe esperar que la precisión alcanzada al realizar estas integraciones sea muy buena. Al no suponer una elevada complejidad implementar este método de integración, finalmente, es el que se ha escogido para realizar los cálculos en esta sección, ya que se trata de un método de orden 4.

Calcular la integral numéricamente requiere de la elección de un punto inicial de la tabla sobre el que comenzar la integración. Esta elección es importante, ya que según cómo se haga, podría implicar mayor o menor precisión en el resultado final. Por simplicidad es preferible empezar por uno de los puntos donde la entropía alcanza un extremo en la tabla (inferior derecha, para el máximo, o superior izquierda, para el mínimo, teniendo en cuenta los signos de las derivadas). Además, es preferible que el punto de arranque esté en una zona que no presente procesos de ionización/recombinación y los resultados coincidan, por tanto, con los valores esperables para el gas ideal simple. De esta forma, se ha decidido comenzar la integración desde la esquina inferior derecha de la tabla, esto es, la zona de altas energías y bajas densidades.

Para examinar la bondad de la integración, es conveniente hacer un estudio de cómo varía la integral dependiendo de que elijamos uno u otro de los dos caminos posibles, i.e. primero integrando en energías internas y luego extendiendo la integral sobre todo el rango de densidades o viceversa. Según escojamos un camino de integración u otro, la integral, esto es, el incremento de entropía, muestra desviaciones relativas máximas en torno al 2% en la zona izquierda de la tabla, mientras que en la zona derecha no se aprecian diferencias mayores que 10^{-6} . En el rango de energías internas cercanas a $2 \cdot 10^{13}$ erg g^{-1} es donde se produce un salto importante en el valor de la desviación. Hemos comprobado que este salto coincide con una discrepancia en las derivadas segundas cruzadas de la entropía. Estudiar esta discrepancia más a fondo se sale del marco de este trabajo: requeriría colaboración con las pocas personas que conocen a fondo los detalles de la construcción de la EDE; por otro lado, la desviación del 2% resultante en la integración según el camino elegido es, en cualquier caso, pequeña y perfectamente aceptable para el uso que se le va a dar en el resto de este trabajo.

4.4.2 Comparación con los resultados de Hans Ludwig

Para entender y apreciar mejor los valores de entropía obtenidos conviene compararlos con los conseguidos a partir de ecuaciones de estado diferentes a la de Bifrost. Disponemos de una figura de curvas adiabáticas, o, más precisamente, isolíneas de la entropía, para la región de temperaturas bajas ($T \leq 2 \cdot 10^4$ K) en un mapa (T, p) , proporcionada por el Dr. Hans Ludwig, de la Universidad de Heidelberg (Alemania). Esta figura fue calculada a partir de la EDE obtenida en el contexto del código COBOLD. La figura es de especial valor pues no aparece en las publicaciones del Dr. Ludwig, según explicación dada por el mismo. En la [Figura 4.5](#) dibujamos las isolíneas de la entropía calculadas por nosotros y, usando un procesador de imágenes incorporado en Python, las superponemos a las de la figura de H. Ludwig (HL). Para poder hacer esta comparación, hemos calculado la función $s = s(T, p)$, realizando interpolaciones en nuestro mapa de entropía.

El acuerdo entre ambos conjuntos de isolíneas es impresionante y sirve como comprobación de los resultados obtenidos. Nótese que, para tener el cero de entropía de igual manera que se tiene en la figura de HL, se ha sumado una cantidad constante a los valores obtenidos por nosotros tras la integración, facilitando de tal manera la comparación de la figura. Como no se conocía dónde se había situado el cero de entropía en la figura de HL, lo que se ha realizado es tomar como aproximación un valor de su mapa de entropía, e igualar ese mismo valor al mapa de entropía calculado por nosotros.

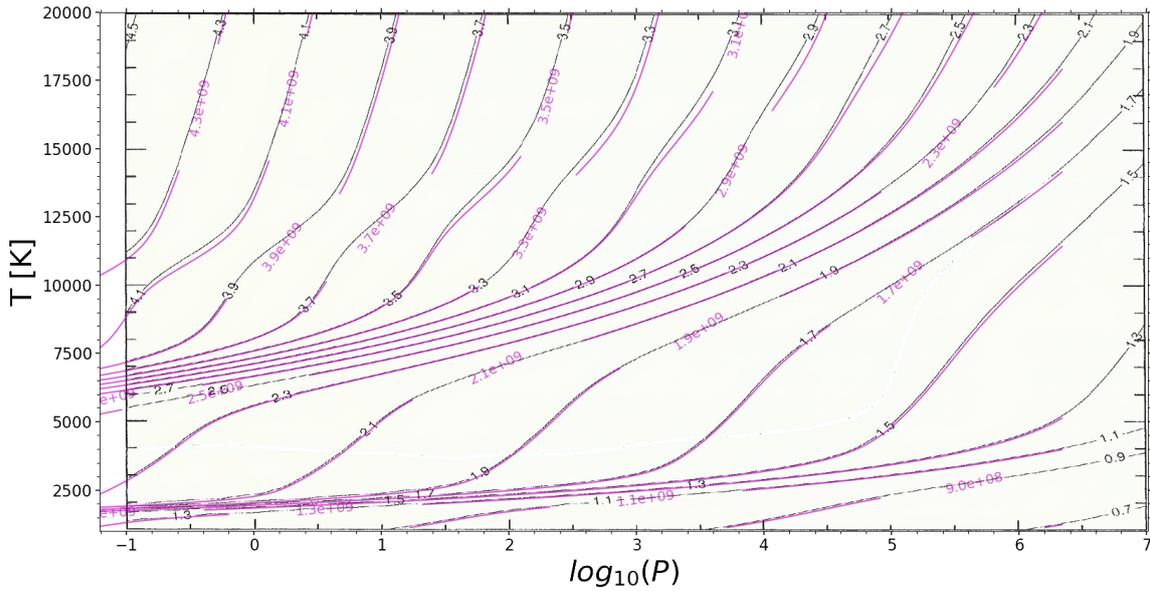


Figura 4.5: Comparación de la variación de entropía obtenida para la EDE de Bifrost (curvas violetas) con las curvas del Dr. Hans Ludwig (curvas negras).

A partir de esta figura, se puede obtener información muy interesante. Al situarse sobre una de las isolíneas en la zona de más altas temperaturas de la figura y comenzar a disminuir la presión, se observa una gran caída de la temperatura. Esta disminución de la temperatura se ve reducida al bajar de los 10^4 K aproximadamente, de tal forma que por mucho más que se baje la presión, la variación de la temperatura es pequeña. Se observan dos franjas o bandas en las que esto ocurre, siendo mucho más pronunciada la banda situada en el rango de temperaturas entre 1000 y 2000 K. Los procesos de formación de moléculas son los responsables de esta disminución en la variación de la temperatura en ese rango. Un efecto similar, pero mucho más suave, es el que se puede visualizar en el rango de temperaturas comprendido entre 6000 y 7000 K, el cual se relaciona con la ionización/recombinación del Hidrógeno. El motivo de estas bandas que se acercan a la isoterma es el siguiente: si elegimos subir a lo largo de una de las isolineas en una de esas bandas, al aumentar presión y densidad a un elemento de gas a entropía constante, el incremento correspondiente de energía interna se invierte en disociar moléculas (banda en el rango de baja temperatura) o en ionizar el Hidrógeno (banda en el rango 6000 - 7000 K) en vez de en aumentar la energía cinética de agitación de los átomos o moléculas, esto es, en vez de aumentar la temperatura. Esto es semejante a los procesos de cambio de estado descritos en la termodinámica elemental (Sección 4.3). Se puede observar, sin embargo, que la constancia de la temperatura no se cumple estrictamente, siendo esto una característica de una situación realista y compleja, como la descrita en las EDE de los códigos de vanguardia.

4.4.3 Comparación con el gradiente adiabático de los gases ideales simples. Segundo coeficiente adiabático de Chandrasekhar

Siguiendo con los mapas de isolíneas de $s(T, p)$, en las regiones fuera de las bandas de formación molecular o ionización de Hidrógeno o Helio deberían mostrar pendientes dadas por valores sencillos de calcular. Una forma de comprobar esta cuestión es usando una cantidad de interés en astrofísica, el así llamado gradiente adiabático, definido como:

$$\nabla_a = \left(\frac{\partial \log T}{\partial \log p} \right)_s, \quad (11)$$

que es justamente la pendiente que queremos estudiar. En general, esta cantidad se puede expresar en términos del cociente de calores específicos, γ , y de coeficientes que miden la presencia de procesos de ionización o formación molecular (R y Q , definidos en la Sección 4.6). ∇_{ad} es totalmente equivalente al así llamado *segundo coeficiente adiabático de Chandrasekhar* (Chandrasekhar, 1939), definido por la relación $\Gamma_2/(\Gamma_2 - 1) = (\partial \log p/\partial \log T)_s$, de modo que $\Gamma_2 = 1/(1 - \nabla_{ad})$. En las zonas del mapa de isolíneas en las que queremos estudiar la pendiente no hay procesos de ionización/recombinación ni asociación/disociación molecular, y ∇_{ad} vale simplemente:

$$\nabla_a = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \quad \text{o bien} \quad \Gamma_2 = \gamma. \quad (12)$$

Tomando $\gamma = 5/3$, se tiene que el valor de estas pendientes ha de ser 0.4 en el diagrama $\log p$ frente a $\log T$. Por tanto, determinamos primero las pendientes de las isolíneas para el rango de temperaturas entre 3000-5000 K (Figura 4.6a). Se ha indicado con segmentos a trazos en color azul la recta de pendiente constante $\nabla_{ad} = 0.4$. En este rango de temperaturas, sabemos que tanto el H como el He se encuentran en estado atómico, por lo que $\gamma = 5/3$ y se mantendrá el valor de 0.4 para el gradiente adiabático. Se ve que el ajuste de las curvas adiabáticas a los valores de entropía en este rango de temperaturas es muy bueno: la aproximación de gas ideal simple es de validez allí. Un procedimiento similar se puede hacer para el rango de temperaturas altas, por encima de 10^5 K. Como se aprecia en la Figura 4.6b, el ajuste de las isolíneas a las rectas de gradiente adiabático igual a 0.4 (indicadas por rectas de trazos en color rojo) es muy bueno también en ese rango, lo que era de esperar pues en esa región ya habíamos visto que el sistema se comporta como gas ideal simple.

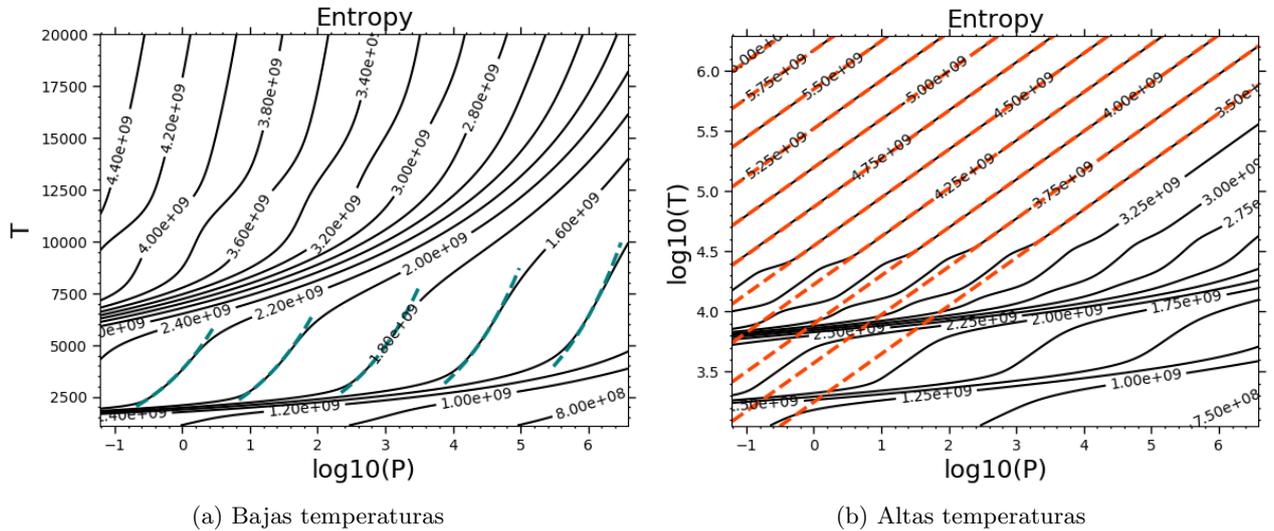


Figura 4.6: Trazado de curvas adiabáticas sobre los mapas de entropía a bajas temperatura (panel izquierdo) y en todo el rango de temperaturas (panel derecho). Las rectas de trazos corresponden al valor correspondiente al gas ideal simple (12).

4.5 Ecuación de la energía

Por todo lo visto hasta ahora, está claro que estudiar la dependencia de la energía interna con la temperatura es fundamental para entender los diferentes regímenes termodinámicos cubiertos por la EDE de Bifrost. En la [Figura 4.7](#) se representa esa dependencia para distintos valores de la densidad. En el caso del gas ideal simple, la relación entre ε y T es lineal: para comparar, en la figura también se ha añadido una línea a trazos que corresponde a la expresión (2) para un caso de gas ideal simple en que tanto el H como el He estén totalmente ionizados ($\gamma = 5/3$ y $\mu = 0.62 \text{ g mol}^{-1}$). De forma inmediata se ve que la relación entre ε y T en la EOS de Bifrost no se ajusta al caso simple, aunque a altas energías ambas expresiones tienden a converger. Por otro lado, se pueden identificar ciertos rangos de energía en los que las curvas tienen una pendiente pronunciada, por ejemplo en torno a $\varepsilon \sim 4 \cdot 10^{12} \text{ erg g}^{-1}$. También se tienen otros rangos de energía interna en los que el aumento de la temperatura es mucho más gradual, e.g., para $\varepsilon \sim 5 \cdot 10^{12} - 1 \cdot 10^{13} \text{ erg g}^{-1}$. A continuación, se va a analizar qué es lo que está ocurriendo.

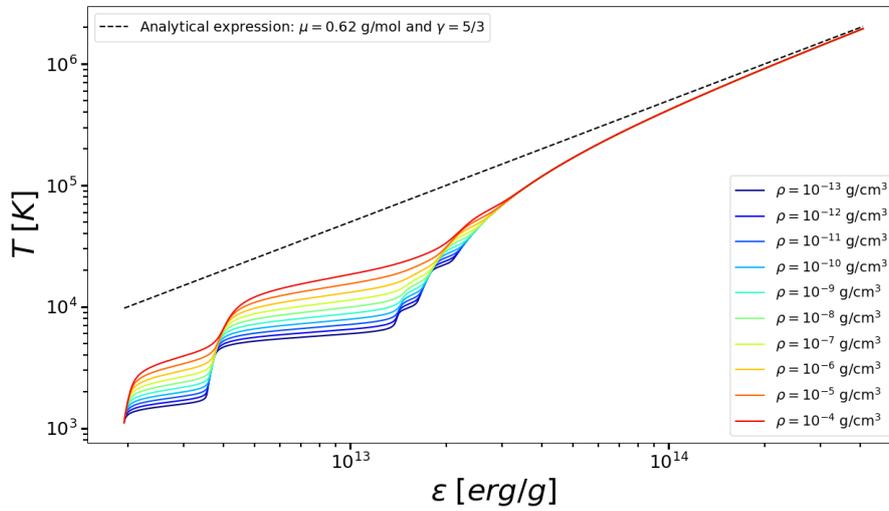


Figura 4.7: Distribución de temperatura respecto de la energía interna para la EDE de Bifrost. El caso de gas ideal simple se muestra con una recta de trazos.

4.5.1 Ecuación teórica

La energía interna de un sistema con componentes microscópicos que pueden estar en diferentes estados de ionización (o de formación molecular) tiene que tener en cuenta no sólo la energía asociada a la agitación térmica, sino también la energía que se necesita (o libera) al ionizar/recombinar los átomos o disociar/formar moléculas. Para conseguir esto, al calcular la energía interna, hay que sumar contribuciones de agitación térmica, que llamaremos ε^t , y contribuciones debidas a la ionización o disociación molecular de los elementos presentes, que llamaremos ε^i :

$$\varepsilon = \varepsilon^t + \varepsilon^i, \quad (13)$$

$$\rho \varepsilon^t = \frac{3}{2} \left(n_e + \sum_i n_i \right) k_B T + \frac{(f_{rot} + f_{vib})}{2} n_{H_2} k_B T, \quad (14)$$

$$\rho \varepsilon^i = \sum_i n_i^* \chi_i, \quad (15)$$

donde el subíndice i indica la suma sobre todas las especies (moléculas, átomos neutros e iones), n_i^* representa la densidad de número de moléculas y elementos ionizados, y χ_i las correspondientes energías de ionización o disociación molecular, siendo $\chi_i > 0$. En el término térmico, se han tenido en cuenta los grados de libertad de rotación y vibración (f_{rot} y f_{vib}) de la molécula de H_2 . En lo que sigue, y como parte del presente Trabajo de Fin de Grado, vamos a partir de la ecuación (13) y obtener expresiones concretas adecuadas a las hipótesis de la EDE de Bifrost, dado que no hemos encontrado ninguna publicación donde aparezca la expresión exacta para la energía interna usada en ella.

Elemento	χ_i [eV]
H ₂	4.52
HII	13.595
HeII	24.580
HeIII	54.403

Tabla 4.2: Energía de disociación molecular del Hidrógeno y de ionización para Hidrógeno y Helio.

Los elementos más abundantes en el Sol son el Hidrógeno y el Helio. Por ello, se desarrollarán de forma explícita los sumatorios anteriores para estos elementos, aunque se dejará indicado cómo añadir de forma general elementos más pesados a pesar de que su contribución sea mucho menor. Para el presente trabajo se va a considerar Hidrógeno molecular (H_2), neutro (HI) e ionizado (HII), y Helio en sus tres posibles estados (HeI, HeII, HeIII). Desarrollando el término de agitación térmica:

$$\rho \varepsilon^t = \frac{3}{2} \left(n_e + n_{H_2} + n_{HI} + n_{HII} + n_{HeI} + n_{HeII} + n_{HeIII} + \sum_{i>2} n_i \right) k_B T + \frac{(f_{rot} + f_{vib})}{2} n_{H_2} k_B T. \quad (16)$$

La densidad de número de las especies se puede expresar en términos de las fracciones de ionización o disociación molecular $x_i = n_i^*/n_i$, con n_i la densidad de número de un elemento en su forma atómica (neutro e iónico) para el caso de los iones, o la densidad de número total de átomos de esa especie para las moléculas; y en términos de las abundancias de número relativas al Hidrógeno $A_i = n_i^{tot}/n_H^{tot}$, ya definidas en la sección (Sección 4.2), donde recordamos que n_i^{tot} es la densidad de número total de átomos de cada elemento en cualquier forma (neutros, iones o moléculas). Por ejemplo, para el caso del Hidrógeno ionizado, $x_{HII} = n_{HII}/n_H$ con n_H la cantidad de Hidrógenos neutros e iónicos; o para el caso del Hidrógeno molecular $x_{H_2} = n_{H_2}/n_H^{tot}$, siendo n_H^{tot} el número total de átomos de Hidrógeno en todas sus formas: $n_H^{tot} = 2n_{H_2} + n_{HI} + n_{HII}$. Por otra parte, el número de electrones n_e se puede expresar por medio de la suma de la densidad de número de los elementos ionizados, teniendo en cuenta, de esta forma, el número de electrones liberados en cada ionización: $n_e = n_{HII} + n_{HeII} + 2n_{HeIII}$. Expresando esta cantidad en términos de las fracciones de ionización, las abundancias relativas y n_H^{tot} , se obtiene para el Hidrógeno y el Helio:

$$n_{el} = n_H^{tot} [(1 - 2x_{H_2}) x_{HII} A_H + (x_{HeII} + 2x_{HeIII}) A_{He}]. \quad (17)$$

Realizando un procedimiento similar para el sumatorio de la densidad de número de las especies ($\sum_i n_i$), y combinándolo al resultado de la ecuación (17), podemos obtener una expresión para la densidad de número total de partículas en el gas:

$$n = n_H^{tot} \left[(1 + x_{HII} - x_{H_2} - 2x_{H_2} x_{HII}) A_H + (1 + x_{HeII} + 2x_{HeIII}) A_{He} + \sum_{i>2} (1 + \sum_{j \leq i} j x_{ij}) A_i \right], \quad (18)$$

donde se ha tenido en cuenta las abundancias y las fracciones de ionización de los elementos más pesados que el Helio, y el subíndice j indica el estado de ionización del elemento i -ésimo.

A continuación, volviendo a la ecuación (13), trataremos el segundo término, que tiene en cuenta las energías de ionización y disociación. Desarrollando la suma $\sum_i n_i^* \chi_i$ se llega a:

$$\sum_i n_i^* \chi_i = n_{HII} \chi_{HII} + n_{HeII} \chi_{HeII} + n_{HeIII} \chi_{HeIII} - n_{H_2} \chi_{H_2} + E_{higher}^{ir}. \quad (19)$$

Esta expresión es válida cuando se considera que el cero de energía de ionización / formación molecular corresponde al caso en el que todos los elementos se encuentren en su estado atómico neutro. Es por eso que la energía de disociación aparece con el signo menos, $-n_{H_2} \chi_{H_2}$. Sin embargo, dejarlo así puede llevar a energías internas totales negativas, lo que es indeseable puesto que se quieren usar logaritmos. Dado que la elección del cero de energía es arbitraria, se suma una cierta cantidad fija a la energía total: en concreto se añade $\chi_{extra} = 5 \text{ eV}$ por cada átomo de H , lo que es suficiente para evitar valores negativos. Se podría haber empleado otra cantidad (siempre por encima de un cierto umbral), pero este es el valor que se ha utilizado en la EDE de Bifrost (como nos han comunicado miembros del equipo de Bifrost). Tenemos, por tanto, finalmente:

$$\rho \varepsilon^i = n_{HII} \chi_{HII} + n_{HeII} \chi_{HeII} + n_{HeIII} \chi_{HeIII} - n_{H_2} \chi_{H_2} + n_H^{tot} \chi_{extra} + E_{higher}^{ir}. \quad (20)$$

Los términos correspondientes a los elementos más pesados que el Helio, E_{higher}^{ir} , se especificarán más adelante. Siguiendo un procedimiento similar al del término de agitación térmica, se puede desarrollar esta expresión en términos de las fracciones de ionización y disociación, y de las abundancias relativas:

$$\rho \varepsilon^i = n_H^{tot} \left\{ \left[(1 - 2x_{H_2}) x_{HII} \chi_{HII} - x_{H_2} \chi_{H_2} + \chi_{extra} \right] A_H + (x_{HeII} \chi_{HeII} + x_{HeIII} \chi_{HeIII}) A_{He} \right\} + E_{higher}^{ir}. \quad (21)$$

Observando esta ecuación, se puede expresar la forma general de las energías de ionización para los elementos con número atómico mayor que 2 como:

$$E_{higher}^{ir} = \sum_{i>2} A_i \sum_{j \leq i} x_{ij} \chi_{ij}. \quad (22)$$

Por otra parte, es posible expresar ρ en términos de las abundancias relativas y de las masas atómicas de la forma siguiente:

$$\rho = \frac{n_H^{tot}}{N_A} \sum_i A_i a_i = n_H^{tot} \frac{k_B}{R_{gas}} \sum_i A_i a_i, \quad (23)$$

donde a_i son las respectivas masas atómicas de las especies, N_A es el número de Avogadro. La suma $\sum_i A_i a_i$ tiene un valor fijo que se puede calcular a partir de la Tabla 4.1b y a saber, 1.44 g mol^{-1} . La expresión (23) para la densidad de masa se puede relacionar con la masa atómica por partícula, de forma que:

$$\mu = \frac{n_H^{tot}}{n} \sum_i A_i a_i . \quad (24)$$

Por último, resta agrupar todas estas expresiones para obtener la ecuación final de la energía interna por unidad de masa como suma de ε^t y ε^i . Los términos de la energía interna de agitación térmica (16) se pueden simplificar teniendo en cuenta las relaciones (23) y (24). Agrupando términos y expresando n_{H_2} en por medio de la fracción de disociación molecular, se llega a:

$$\varepsilon^t = \frac{3 R_{gas}}{2 \mu} T + \frac{f_{rot} + f_{vib}}{2 \sum_i A_i a_i} x_{H_2} R_{gas} T . \quad (25)$$

Para el término de la energía interna de ionización por unidad de masa, agruparemos las ecuaciones (21) y (22), y teniendo en cuenta la expresión (23), se puede llegar a:

$$\varepsilon^i = \frac{R_{gas}}{k_B \sum_i A_i a_i} \left[\left[(1 - 2x_{H_2}) x_{HII} \chi_{HII} - x_{H_2} \chi_{H_2} + \chi_{extra} \right] A_H + \right. \\ \left. + (x_{HeII} \chi_{HeII} + x_{HeIII} \chi_{HeIII}) A_{He} + \sum_i A_i \sum_j x_{ij} \chi_{ij} \right] . \quad (26)$$

4.5.2 Comprobación de la ecuación

Una vez obtenida la ecuación completa para la energía interna, se va a comprobar si predice comportamientos observados en las curvas de la Figura 4.7, esto es, si se adapta a lo contenido en la EOS de Bifrost en rangos donde es posible comprobarlo de forma relativamente simple. Para ello, se dibujarán curvas para $T(\varepsilon)$ basadas en la suma del término térmico ε^t y del término de ionización ε^i para casos particulares en que la fracción de ionización y disociación molecular son constantes e iguales a 0 ó 1; sabemos de antemano, por lo que hemos visto en la Sección 4.2, que la EDE de Bifrost sólo se adaptará a dichas expresiones en rangos limitados de T y ε . La comprobación de la expresión en el caso más general requeriría calcular las fracciones de ionización y/o disociación mediante la ecuación de Saha-Boltzmann, lo que rebasaría el marco de este trabajo. Tomaremos 5 casos distintos, a saber, los mismos de la Tabla 4.1b.

Los resultados obtenidos para los distintos casos se muestran en la Figura 4.8. Se observa que las curvas calculadas con la ecuación teórica se ajustan muy bien a los resultados de la EDE de Bifrost en determinados rangos de energía. Dichos rangos de energía corresponden exactamente a los rangos en que la masa atómica por partícula μ alcanzaba una *meseta* en la Figura 4.3. La explicación de por qué las curvas de trazos en esta figura (Figura 4.8) tienen forma de arco es sencilla. A bajas temperaturas, el término de agitación térmica es despreciable frente al término de energía de ionización y disociación, que es constante para cada una de dichas curvas; los arcos de curva tienden, por tanto, asintóticamente a dicho valor constante. En el sentido contrario, a medida que aumenta la temperatura, la contribución del término de agitación térmica se vuelve dominante sobre el término de ionización. Cuando la temperatura aumenta lo suficiente, acaba habiendo proporcionalidad entre ambas magnitudes, provocando el efecto observado en la figura: las curvas terminan por converger a las líneas negras a trazos. Cuanto mayor sea la contribución del término de energía de ionización,

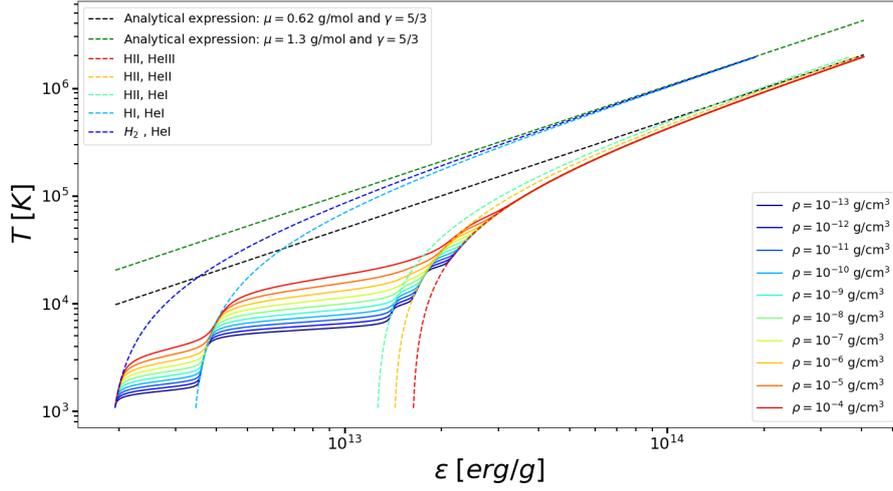


Figura 4.8: Distribución de temperatura respecto de la energía interna junto con los valores teóricos calculados por la suma de expresiones (25) y (26). Estos valores se ajustan a la perfección con los regímenes de gas ideal simple.

mayores energías se necesitarán para que la curva de trazos alcance el régimen asintótico lineal, ya que el término de agitación térmica tendrá que aumentar mucho más para poder compensar el término de ionización. Esto último se ve reflejado en las curvas de ionización del H y del He. Se podría hacer una estimación de la temperatura a la que el término de agitación térmica va a ser dominante. Si por ejemplo se asume que dicho término comienza a ser dominante cuando ambas cantidades difieren en un orden de magnitud, se podrá desprejiciar el término de la energía de ionización para temperaturas superiores a $6 \cdot 10^5$ K. Aproximadamente, este es el valor que se estimó para la corona solar en el modelo tridimensional de Bifrost, concluyendo, por tanto, que se trata de un régimen de gas ideal simple.

Las curvas obtenidas con la ecuación teórica en caso de tener H_2 y HeI, ó HI y HeI convergen a una misma recta, pero distinta a la de los otros tres casos. Este efecto se debe al hecho de estar teniendo en cuenta los grados de libertad de rotación y vibración en la molécula de Hidrógeno, provocando una compensación en el término de energía interna de agitación térmica. Por tanto, es interesante estudiar el número de grados de libertad de H_2 que se ha utilizado en la EDE de Bifrost. Para ello, hemos estudiado cuatro posibilidades: considerar todas las contribuciones posibles (2 de rotación y 1 de vibración), solo la contribución de los grados de libertad de rotación en su totalidad, un único grado de libertad de rotación, o ninguna contribución. En la Figura 4.9 se puede ver un ajuste muy bueno cuando consideramos todos los grados de libertad de la molécula de Hidrógeno, siendo esta, por lo que vemos, la configuración que emplea la EDE de Bifrost. El hecho de no tener en cuenta esta contribución, producirá desviaciones de en torno al 1% de la energía en la región de bajas temperaturas.

4.6 Coeficientes R y Q

En muchos trabajos que tratan con gases con composición química variable debido a procesos de ionización/recombinación o formación/disociación molecular se usan dos coeficientes, R y Q , que miden de manera sensible en qué regiones dichos procesos están teniendo lugar. Estas cantidades se definen como:

$$R \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \left(\frac{\partial \log \mu}{\partial \log p} \right)_T ; \quad Q \stackrel{\text{def}}{=} 1 - \left(\frac{\partial \log \mu}{\partial \log T} \right)_p . \quad (27)$$

En las zonas en las que el número de partículas de cada especie iónica o molecular se mantiene

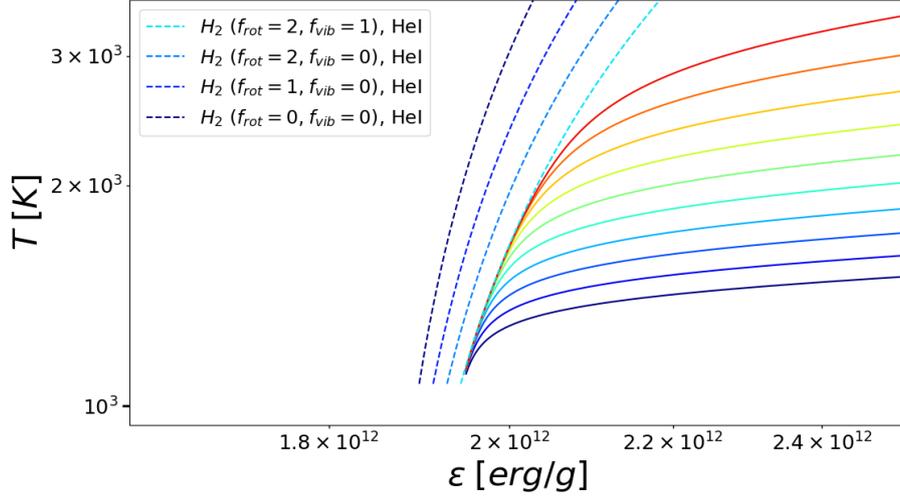


Figura 4.9: Comparativa de los posibles grados de libertad que se pueden tener en cuenta en la molécula de Hidrógeno, observando que la EDE de Bifrost utiliza todos los grados de libertad de rotación y vibración para la misma.

constante, estas cantidades serán iguales a la unidad, al anularse las derivadas de μ , mientras que en aquellas regiones en las que hayan procesos de ionización/recombinación o asociación/disociación molecular, dichas cantidades diferirán de la unidad.

En la [Figura 4.10](#) se presenta un mapa de color de ambos coeficientes con coordenadas termodinámicas T y p . Las cuatro bandas aparentes en el mapa señalan claramente los rangos de temperatura en los que los procesos de ionización/recombinación o formación/disociación molecular tienen lugar. Además, los dos bandas más a la izquierda son mucho más marcadas. Esto es razonable, ya que en esos rangos de temperatura se está produciendo la disociación molecular y la ionización del Hidrógeno respectivamente. El Hidrógeno es el elemento más abundante y por ello estas bandas son más pronunciadas que las otras, las cuales se corresponden con las distintas ionizaciones del Helio.

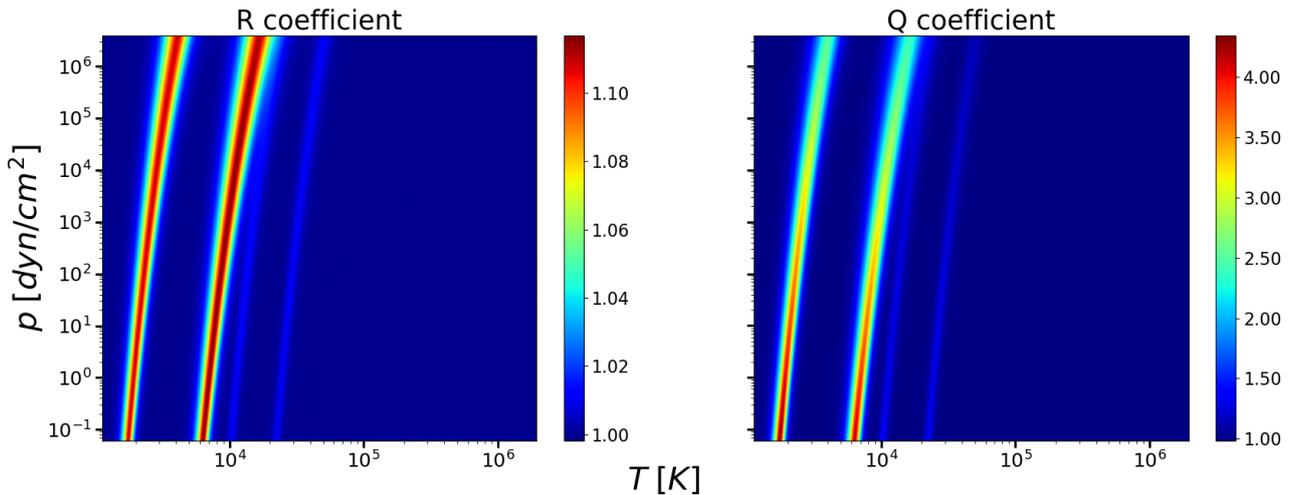


Figura 4.10: Mapa de color de los coeficientes R y Q respecto de variables termodinámicas T y p

4.7 Calor específico c_p y γ

Otras cantidades de interés que no se podían determinar sin los resultados previos son el calor específico a presión constante c_p , y el coeficiente de expansión adiabático γ . La constancia de esta última cantidad dará una idea acerca de en qué regímenes se puede considerar de validez la ecuación analítica.

Por definición, $c_p = T (\partial s / \partial T)_p$, pero realizar este cálculo requiere muchas operaciones numéricas que hacen aumentar el error numérico. En cambio, usando fórmulas estándar válidas para los gases con ionización parcial, se puede determinar esta cantidad por medio de c_v y de los coeficientes R y Q , de la forma:

$$c_p = c_v + \frac{R_{gas} Q^2}{\mu R} \quad (28)$$

A partir de ahí, podemos determinar el valor de γ , ya que por definición es:

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} \quad (29)$$

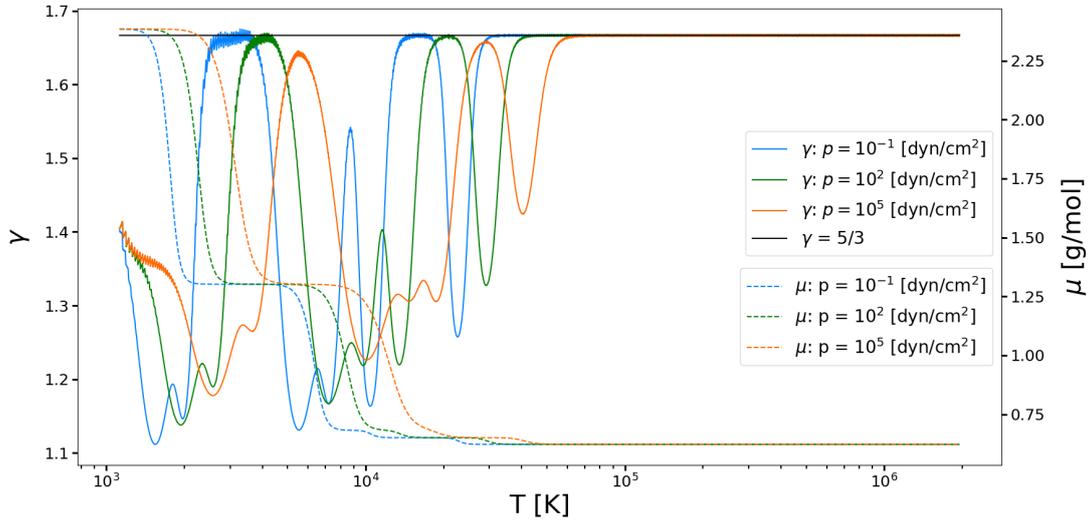


Figura 4.11: Valor de γ para distintos valores de presión. Se ha superpuesto el valor de μ calculado en el mismo rango de valores para apreciar la sensibilidad de γ a los procesos de ionización y disociación molecular.

En la Figura 4.11 se puede ver el comportamiento de γ frente a la temperatura para distintos valores de densidad. Además, se ha representado de fondo el comportamiento de μ , que como se ha visto, da cuenta también de los rangos de temperatura en los que tienen lugar procesos de ionización/recombinación.

En los rangos de temperatura en los que μ permanece constante, el valor de γ tiende a $5/3$, pero como se puede ver en la gráfica, esto no siempre termina por cumplirse. Los rangos de temperatura en los que tiene lugar la ionización del He son relativamente pequeños. En estas zonas, el valor de γ tiende a aumentar hasta $5/3$, pero rápidamente disminuye antes de alcanzar el valor esperado en la región de gas ideal simple. Por tanto, que el valor de μ sea constante en un rango de temperaturas, no es garantía de que el valor de γ sea $5/3$. Esta cantidad es más sensible a los procesos de ionización o disociación molecular que el valor de la masa atómica por partícula, jugando un papel fundamental a

la hora de detectar cambios en la composición.

En la [Sección 4.5.2](#) vimos que para la molécula de H se tienen en cuenta dos grados de libertad de rotación y uno de vibración. Esto da lugar a que en la región de H molecular se tenga teóricamente $\gamma = 4/3$. En el rango de bajas temperaturas ($1 \cdot 10^3 - 2 \cdot 10^3$ K), las curvas de bajas presiones no son constantes (azul y verde), y la de mayor presión (curva naranja) tiende a ser ligeramente constante sobre $4/3$, pero rápidamente cambia: el rango de temperaturas en el que H₂ se puede considerar como gas ideal simple con $\gamma = 4/3$ es muy pequeño, o prácticamente inexistente, resultado que no se refleja en el valor de μ .

Por otra parte, en la región de bajas temperaturas, se puede ver que γ presenta oscilaciones. Estas variaciones son debidas a errores numéricos acumulativos, ya que para calcular esta cantidad se han hecho interpolaciones y derivaciones, las cuales producen que los errores se acentúen dando lugar a inestabilidades numéricas.

4.8 Velocidad del sonido (c_s) y primer coeficiente adiabático de Chandrasekhar

La velocidad del sonido es la velocidad de fase de una onda de presión en ausencia de fenómenos de transporte como conducción de calor o viscosidad y también de enfriamiento radiativo. La velocidad del sonido viene dada por (ver, por ejemplo, [Landau & Lifshitz, 1987](#), capítulo 8):

$$c_s^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s . \quad (30)$$

Vemos que se puede calcular directamente usando fórmulas termodinámicas: se trata de una propiedad termodinámica del medio considerado, y varía de punto a punto. En el caso de gas ideal simple sin ionización ni formación molecular, es fácil calcular que:

$$c_s^2 (\text{gas ideal simple}) = \gamma \frac{p}{\rho} = \frac{R_{gas}}{\mu} T . \quad (31)$$

En el caso general de gas ideal con ionización y formación molecular variables, considerando $p[\rho, \varepsilon(\rho, s)]$ y diferenciando, se puede obtener una expresión para calcular la velocidad del sonido a partir de las tablas originales de la EDE de Bifrost, de forma que se reduce el error numérico cometido:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_\varepsilon + \frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \right)_\rho . \quad (32)$$

El cómputo de esta cantidad se muestra en la [Figura 4.12](#) para distintos valores de densidad de masa. Las líneas discontinuas representan el valor de c_s calculado por medio de la ecuación analítica del gas ideal simple (31) para los posibles valores de μ teóricos. En los rangos de temperatura en los que no hay procesos de cambio de composición, las curvas se ajustan a las rectas en buena medida. Este fenómeno no se produce para todos los casos, ya que como se vio en la figura de γ , para temperaturas de 10^4 y ligeramente superiores, γ tiende a aumentar a $5/3$, pero no llega y vuelve a decrecer. Al calcular la velocidad del sonido para el caso de H ionizado y He sin ionizar, se ha tomado $\gamma = 5/3$, y por eso las curvas no son proporcionales a $T^{1/2}$. Cuanto más baja sea la densidad (curvas azules), γ es mayor en este rango (sin alcanzar el valor de $5/3$), y por eso estas curvas se acercan más a las rectas de la figura.

A partir de estos resultados se puede ver que, en el Sol, la velocidad del sonido en la fotosfera es de unos 6 km s^{-1} , mientras que para la corona solar se tienen velocidades mucho mayores, en torno a

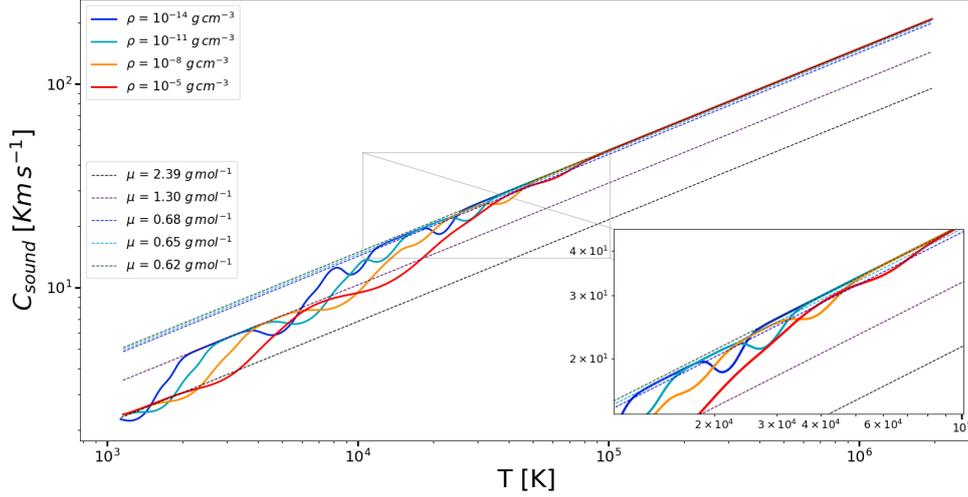


Figura 4.12: Velocidad del sonido calculada para la EDE de Bifrost en un rango de densidades (líneas continuas), junto con la expectativa del gas ideal simple en diferentes regímenes (líneas a trazos).

200 km s⁻¹. Esto provoca que sea más difícil que se produzcan choques en la corona que en la fotosfera.

La velocidad del sonido está directamente ligada al primer coeficiente adiabático de Chandrasekhar (Chandrasekhar, 1939), Γ_1 , que se define como:

$$\Gamma_1 = \left(\frac{\partial \log p}{\partial \log \rho} \right)_s. \quad (33)$$

Vemos que $\Gamma_1 = c_s^2 \rho / p = c_s^2 \mu / (R_{gas} T)$. Por tanto, si se fuera a usar la tabla de Bifrost para determinar coeficientes de Chandrasekhar, el cálculo realizado para obtener la velocidad del sonido permitiría obtener directamente Γ_1 .

5 Relaciones de salto de Rankine-Hugoniot: la curva de Hugoniot

The jumps in thermodynamic quantities as the gas goes through a shock and the corresponding Hugoniot curves are calculated from the Bifrost EOS. Analytical expressions for special cases are developed, compared with the numerical results and the underlying physics discussed. Particular cases for the Hugoniot curve of interest for the solar atmosphere (particularly, the chromosphere) are presented.

Un conjunto de ecuaciones fundamentales en la teoría de choques son las relaciones de salto de Rankine-Hugoniot (RH) (Courant & Friedrichs, 1948; Landau & Lifshitz, 1987), que son relaciones algebraicas resultantes de exigir la conservación de masa, impulso y energía a través de un choque. Escribiendo subíndices 0 y 1 para los estados pre- y post-choque del gas, respectivamente, dichas relaciones son:

$$\rho_1 u_1 = \rho_0 u_0, \quad (34)$$

$$\rho_1 u_1^2 + p_1 = \rho_0 u_0^2 + p_0, \quad (35)$$

$$\frac{u_1^2}{2} + \varepsilon_1 + \frac{p_1}{\rho_1} = \frac{u_0^2}{2} + \varepsilon_0 + \frac{p_0}{\rho_0}. \quad (36)$$

En lo anterior, u es la velocidad del gas *relativa* al frente de choque. Las relaciones anteriores son muy generales: son válidas para cualquier fluido que cumpla las leyes de conservación estándar, esto es,

no sólo para gases ideales. La tercera relación de este conjunto de ecuaciones se puede expresar por medio de las cantidades termodinámicas ε , ρ , y p como sigue:

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_0 = \frac{p_0 + p_1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right). \quad (37)$$

Dado que $p = p(\varepsilon, \rho)$ y que todas ellas se pueden obtener de los datos originales de la EDE de Bifrost, esta ecuación es un buen punto de partida para el estudio de los choques en esta EDE. Una condición extra que se obtiene en la teoría de choques gaseosos es la **condición de la entropía**, la cual expresa que, al atravesar la discontinuidad, la entropía por unidad de masa del gas sólo puede aumentar. Este aumento de entropía se puede entender como consecuencia de los procesos irreversibles en los que se disipa energía en el frente de choque debido a los grandes gradientes de velocidad y temperatura que adopta el gas en el frente. Siguiendo la misma notación para los estados entrantes y salientes, esta condición se expresa como:

$$s_1 > s_0. \quad (38)$$

A través de esta condición, se puede deducir que la presión y la densidad post-choque han de ser mayores que sus valores respectivos de entrada. También se puede probar que la velocidad relativa de entrada del gas al choque, $|u_0|$, ha de ser mayor que la de salida, $|u_1|$. En resumen:

$$p_1 > p_0 ; \quad \rho_1 > \rho_0 ; \quad |u_1| < |u_0|. \quad (39)$$

Otra cantidad de interés a la hora de tratar choques es el número de Mach. Se define como el cociente entre la velocidad del fluido y la velocidad del sonido del fluido para las condiciones termodinámicas locales del medio. En concreto:

$$M_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|u_0|}{c_{s_0}} ; \quad M_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|u_1|}{c_{s_1}}. \quad (40)$$

En la [Sección 4.5.1](#) vimos que la energía interna se podía expresar como la suma de contribuciones de agitación térmica, ε^t , por un lado, y de ionización / formación molecular, ε^i , por otro. Cuando se está tratando exclusivamente con un gas ideal simple, se tiene $\varepsilon^t = p/\rho/(\gamma - 1)$, de modo que:

$$\varepsilon = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho} + \varepsilon^i, \quad (41)$$

y, además, el término ε^i es constante; dada la arbitrariedad en la elección del cero de energías internas, normalmente se elimina dicho término constante, resultando la expresión usual de los libros elementales que también hemos usado en la primera parte de este trabajo (2). Aquí, sin embargo, aun en los casos en que suponemos que el estado inicial y final están en regiones en que el gas se comporta como gas ideal simple (con ε^i constante), ocurre, como vamos a ver, que los estados de ionización y formación molecular son distintos entre ellos. Por tanto, incluso cuando tratemos con estados pre- o post-choque de gas ideal simple, habremos de retener el segundo término de la derecha de (41), distinguiendo su valor en dichas zonas, ε_0^i y ε_1^i , respectivamente.

5.1 Curvas de Hugoniot

Teniendo en cuenta que la energía interna es, con toda generalidad en termodinámica, función de presión y densidad, $\varepsilon(p, \rho)$, la tercera relación de Rankine-Hugoniot en la forma (37) se puede ver como una ecuación que liga p_1 , ρ_1 con los valores respectivos pre-choque p_0 , ρ_0 . A la colección de valores posibles de presión y densidad post-choque para valores p_0 , ρ_0 pre-choque dados se le llama **curva de Hugoniot**. En general, también para un gas ideal genérico no simple, esta curva hay que calcularla por métodos numéricos, como haremos aquí. Sin embargo, para comenzar, es adecuado

estudiar estas curvas en el caso en que el estado pre- y post-choque sea un gas ideal simple con los mismos valores para el término de ionización: $\varepsilon_0^i = \varepsilon_1^i$. En los casos en los que el estado entrante o los estados de salida se encuentren sobre una región con procesos de ionización o disociación molecular en marcha, no se podrá obtener una expresión analítica para la curva de Hugoniot, al no conocer la energía interna de ionización en esos estados.

5.1.1 Curva de Hugoniot para estados entrante y saliente de gas ideal simple con las mismas constantes

Este es el caso más simple y el que se toma como referencia para entender los efectos que producen los choques a las cantidades termodinámicas, estando descrito en muchos libros elementales de teoría de choques. Sustituyendo la ecuación analítica de la energía interna del gas ideal simple (2) en la ecuación (37) y desarrollando la expresión, se obtiene fácilmente la ecuación de una hipérbola equilátera con variables $1/\rho$ y p :

$$\left(\frac{\rho_0}{\rho_1} - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}\right) \left(\frac{p_1}{p_0} \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} + 1\right) = \frac{4\gamma}{\gamma^2 - 1}. \quad (42)$$

Vemos que se obtiene una única curva para las razones de salto $p_1/p_0, \rho_1/\rho_0$, independientemente de los valores concretos ρ_0, p_0 del estado entrante al choque. Dicha curva se ha dibujado en la [Figura 5.1](#) con ejes ρ_0/ρ_1 en abscisas y p_1/p_0 en ordenadas, como es práctica habitual. La curva de Hugoniot elemental de la figura tiene una asíntota vertical $p_1/p_0 \rightarrow \infty$ localizada en:

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}, \quad (43)$$

esto es, la presión puede aumentar indefinidamente tras el choque, pero el salto de densidad tiene un límite finito.

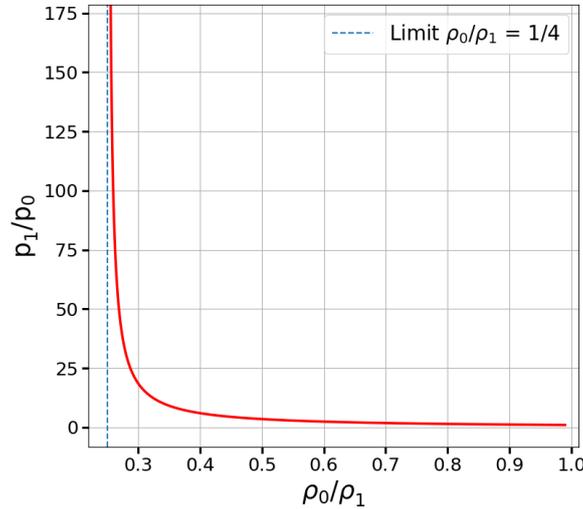


Figura 5.1: Curva de Hugoniot para el caso en que el estado entrante y saliente sean de gas ideal simple y con mismo valor de la constante de ionización. La curva está dada por la ecuación (42) para $\gamma = 5/3$.

5.1.2 Curva de Hugoniot para estados entrante y saliente de gas ideal simple pero con constantes diferentes

Pasamos a considerar la situación en que tanto el estado de entrada como el de salida sean gases ideales simples, por tanto con $R = Q = 1$, pero con valores de γ , μ y ε^i que pueden ser diferentes a un lado y otro del choque. Esto es, puede ocurrir que:

$$\gamma_0 \neq \gamma_1 ; \mu_0 \neq \mu_1 ; \varepsilon_0^i \neq \varepsilon_1^i , \quad (44)$$

aunque

$$R_1 = R_0 = Q_1 = Q_0 = 1 . \quad (45)$$

Esta situación es realista cuando al paso del choque se ionice el gas (o se produzca disociación molecular), cambiando el valor de tales cantidades, pero la región termodinámica a la que se llegue sea tal que en ella ya no hay más procesos de ionización ni de disociación molecular. Esta situación provoca un cambio interesante con respecto al resultado anterior de la ecuación (42). Al desarrollar la ecuación (37) para obtener la curva de Hugoniot en este caso usando la expresión (41), se llega a:

$$\left(\frac{\rho_0}{\rho_1} - \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1 + 1} \right) \left(\frac{p_1}{p_0} \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} + 1 \right) = \frac{2(\gamma_0 + \gamma_1)}{(\gamma_0 - 1)(\gamma_1 + 1)} - 2H_0 , \quad (46)$$

donde se ha definido la constante $H_0 = (\varepsilon_1^i - \varepsilon_0^i) \rho_0 / p_0$. Esta curva sigue siendo una hipérbola equilátera, pero con una constante en el lado de la derecha que puede adoptar valores positivos o negativos. Si ahora se determina el límite de choque fuerte, i.e. $p_1 \gg p_0$, se puede ver que el salto de presión p_1/p_0 tiende a una asíntota vertical igual que antes, y que esta asíntota ocurre para el siguiente salto de densidad:

$$\frac{\rho_1}{\rho_0} = \frac{\gamma_1 + 1}{\gamma_1 - 1} , \quad (47)$$

esto es, el valor límite al que tiende el salto de densidad depende de las características del estado final exclusivamente. Esto supone un cambio con respecto al caso anterior, ya que se podría pensar que el salto podría depender también del estado entrante, pero como se acaba de ver, no es cierto, hay que pensar en términos del estado de salida. Si en la ecuación (46) se considerase el caso simple en que tanto γ como ε^i son iguales a ambos lados del choque, se recupera la ecuación (42), siendo estas expresiones consistentes.

Otra característica importante de la expresión (46) es el valor de la constante H_0 . Esta constante se puede interpretar como el valor del salto de la energía de ionización frente al valor de la energía interna de agitación térmica del estado entrante, salvo una constante de orden unidad. Además, se puede ver que la orientación de la hipérbola resultante cambia de signo según sea el signo del término de la derecha en (46), de manera que se puede tener una hipérbola orientada hacia izquierdas (en el sentido de que un aumento del salto de presión se consigue con una disminución del salto de densidad) o a derechas; la curva de Hugoniot clásica de los gases ideales simples (42) tiene dicho término positivo y orientación a derechas. Teniendo en general las dos posibilidades, la curva de Hugoniot podrá acercarse a la asíntota de la densidad por ambos lados, esto es, con valores del salto de densidad ρ_1/ρ_0 superiores o inferiores al valor asíntótico. Acercarse a la asíntota con valores del salto de densidad superiores al asíntótico es un comportamiento que extraña a primera vista comparado con el caso simple, pero veremos que es un caso realista que aparecerá cuando el salto de la energía de ionización sea suficientemente grande frente a la energía interna de agitación térmica pre-choque. Veremos estos comportamientos en la [Sección 5.2](#).

5.1.3 Derivadas a lo largo de la curva de Hugoniot: caso de gas ideal general

En el caso de gas ideal general, la curva de Hugoniot no tiene expresión analítica, y en general no será una hipérbola. Para obtenerla, hay que acudir a determinación numérica, como vamos a hacer en las secciones siguientes. Sin embargo, es posible calcular una expresión general que dé cuenta de la variación de la presión con respecto de la densidad a lo largo de la curva de Hugoniot para choques de intensidad arbitraria, esto es, débiles, fuertes o intermedios. Para calcularla, consideramos que la curva de Hugoniot proporciona una dependencia mutua entre la presión y densidad post-choque, por ejemplo $p_1(\rho_1)$; con los valores p_1 y ρ_1 , además, se puede calcular la energía interna post-choque usando la función termodinámica general $\varepsilon(p, \rho)$, esto es: $\varepsilon_1 = \varepsilon[p_1(\rho_1), \rho_1]$. Utilizando dichas dependencias en la ecuación (37) y derivando respecto de ρ_1 al movernos a lo largo de la curva de Hugoniot, se obtiene (indicamos las derivadas a lo largo de la curva de Hugoniot mediante un subíndice H):

$$\left(\frac{dp_1}{d\rho_1}\right)_H \left\{ \left[\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial p}\right)_\rho \right]_{(\rho,p)=(\rho_1,p_1)} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho_1} \right) \right\} = \frac{p_0 + p_1}{2\rho_1^2} - \left[\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\right)_p \right]_{(\rho,p)=(\rho_1,p_1)} \quad (48)$$

Usando resultados de la teoría de gases con procesos de ionización/recombinación o formación/disociación molecular, sabemos que :

$$\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial p}\right)_\rho = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{Q}{\rho}, \quad (49)$$

$$\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\rho}\right)_p = -\frac{p}{\rho^2} \left(\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{Q}{R} - 1 \right), \quad (50)$$

de modo que es posible simplificar la ecuación (48) y ponerla como sigue:

$$\left(\frac{d\log p_1}{d\log \rho_1}\right)_H = \frac{1 - \frac{p_0}{p_1} - \frac{2\gamma_1}{\gamma_1-1} \frac{Q_1}{R_1}}{\frac{\rho_1}{\rho_0} - 1 - \frac{2Q_1}{\gamma_1-1}}, \quad (51)$$

que es la expresión que estábamos buscando. El denominador del término de la derecha puede hacerse cero, en cuyo caso la curva de Hugoniot se hará vertical; en el caso de gas ideal simple esto ocurre sólo en el valor de la asíntota vertical dado por (47). En general, sin embargo, se puede tener puntos en que la curva tiene pendiente infinita sin que presión ni densidad se vayan al infinito, como vamos a ver en las próximas secciones.

Dicha ecuación se puede particularizar de forma inmediata para el límite de choque débil, esto es, $p_1 \rightarrow p_0$ y $\rho_1 \rightarrow \rho_0$, obteniendo una expresión muy simple:

$$\left(\frac{d\log p_1}{d\log \rho_1}\right)_H (\rho_1 \rightarrow \rho_0, p_1 \rightarrow p_0) = \frac{\gamma_0}{R_0}. \quad (52)$$

El término de la derecha, por termodinámica de gases ideales parcialmente ionizados, resulta ser exactamente la pendiente logarítmica de la curva adiabática (esto es, de entropía constante) que pasa por (ρ_0, p_0) . Por tanto, la curva de Hugoniot y la curva a entropía constante son tangentes en el punto ρ_0, p_0 . Este resultado coincide con lo que se aprende en teoría general de ondas de choque (ver los textos de Landau & Lifshitz 1987, Courant & Friedrichs 1948 o Zel'dovich & Raizer 1967) y refleja el hecho de que en el límite de choque débil los choques se convierten en perturbaciones de sonido estándar, que son, precisamente, adiabáticas.

5.2 Cálculo y resultados

Excepto en los casos simples tratados en la [Sección 5.1](#) ([Sección 5.1.1](#) y [Sección 5.1.2](#)), para calcular la curva de Hugoniot correspondiente a un estado entrante arbitrario dentro de la tabla de la EDE de Bifrost hay que acudir a métodos numéricos. Para ello, vamos a realizar el siguiente procedimiento general. Dado un estado pre-choque ρ_0 , ε_0 y p_0 , queremos saber si para un cierto valor ρ_1 de la densidad de salida escogida, el valor es admisible como densidad post-choque, esto es, si existen uno o más valores de energía interna ε_1 , y presión p_1 que, junto con ρ_1 , satisfagan las relaciones de Rankine-Hugoniot para el estado pre-choque dado. Presión y energía interna salientes tienen que estar relacionados tanto por la EDE de Bifrost, esto es, $p_1 = p_{EOS}(\varepsilon_1, \rho_1)$, como por la relación (37). Crearemos por tanto un conjunto de valores *de prueba* (un *array* de python) para ε_1 , al que podemos llamar $(\varepsilon_1)_{test}$, y calcularemos tanto los valores de presión correspondientes mediante la tabla de Bifrost, $p_{EOS}[(\varepsilon_1)_{test}, \rho_1]$, como los valores de p_1 obtenidos a partir de (37) para ese mismo array. Usando un localizador de ceros, determinamos el valor (o conjunto finito de valores) de ε_1 para el que la diferencia de ambas funciones se anula. Ese valor, y el correspondiente p_1 , serán la solución al problema. En caso de no encontrarse ceros, eso indicaría que la elección de ρ_1 no correspondía a un caso viable de densidad post-choque. Con los valores de ρ_1 y ε_1 , la tabla de Bifrost proporciona T_1 directamente. Con estos valores, las primeras relaciones de RH (34 y 35) permiten fácilmente calcular u_0 y u_1 , y, mediante la velocidad del sonido $c_s(\rho_0, \varepsilon_0)$, el número de Mach entrante, M_0 . Probando diferentes valores de ρ_1 , se puede obtener la curva de Hugoniot.

Presentamos en el resto de esta sección las curvas de Hugoniot calculadas para cinco casos ([Figura 5.2](#) - [Figura 5.6](#)) que ilustran la forma y peculiaridades de dichas curvas en diferentes regiones de la tabla de EDE de Bifrost. Los resultados obtenidos se analizan mediante cuatro paneles para cada caso, a saber: 1. (panel superior izquierdo) valores de p_1 y T_1 dibujados sobre un mapa de color del coeficiente R , lo que permite visualizar fácilmente las bandas de ionización/recombinación; 2. (panel superior derecho) curva de Hugoniot en sí, esto es, salto de presión p_1/p_0 frente al salto inverso de densidad ρ_0/ρ_1 . 3. (panel inferior izquierdo) número de Mach entrante, M_0 , frente al salto de temperatura; y 4. (panel inferior derecho) diagrama del salto de temperatura frente al salto de volumen específico. En todos los casos, se ha representado mediante una curva roja lo que se obtendría de suponer ciegamente que el gas se comporta como gas ideal simple con valores constantes iguales a los iniciales. En la [Figura 5.7](#), finalmente, se pueden ver los valores de entropía salientes correspondientes a las curvas de Hugoniot de cuatro de los casos discutidos.

5.2.1 Estado pre-choque en la región HII y HeIII

En la [Figura 5.2](#) se muestra el caso en que tanto el estado entrante como los salientes se encuentran en regiones de la tabla de la EDE correspondientes a gas ideal simple y con los mismos valores constantes de calores específicos y $\gamma = 5/3$. Se ha realizado el cálculo en la zona de altas temperaturas, pero de bajas densidades, de manera que los resultados lleguen a saltos de presión lo más altos posibles: esta región corresponde a una situación en que tanto el Hidrógeno como el Helio están totalmente ionizados (HII y HeIII). El acuerdo entre los resultados obtenidos y los dados por las expresiones de la teoría elemental del gas ideal simple (curvas rojas) es realmente bueno para todas las cantidades calculadas. En particular, como se comentó en la [Sección 5.1.1](#), los valores de presión siguen una hipérbola equilátera con asíntota vertical situada en el valor límite $\rho_0/\rho_1 = (\gamma - 1)/(\gamma + 1)$ (ecuación 43). En el panel superior derecha se observa claramente cómo la asíntota de altas presiones se alcanza para este límite. Tanto el número de Mach entrante (panel inferior izquierda) como los valores del salto de temperatura (panel inferior derecha) son los esperados a partir de la teoría elemental.

5.2.2 Estado pre-choque en la región HII y HeI

Este caso se representa en la [Figura 5.3](#). Hemos elegido un estado pre-choque en una región con Hidrógeno totalmente ionizado pero Helio neutro y tal que los estados de salida coincidan lo máximo posible con regímenes normales de atmósfera solar. En el panel superior izquierda vemos que la curva de Hugoniot atraviesa las bandas de ionización del HeI y del HeII. A pesar de que estas bandas son estrechas, ya se empiezan a observar discrepancias con respecto al caso de choques para un gas ideal simple (curva roja). De aquí en adelante será preciso utilizar la ecuación (46) para comprender qué está ocurriendo realmente.

La curva de Hugoniot adopta un aspecto peculiar e interesante (panel superior derecha). Al comienzo, sigue el comportamiento del gas ideal simple (curva roja), pero a medida que la densidad post-choque aumenta, se observa una disminución del aumento de la presión post-choque respecto del caso de gas ideal simple (o, visión equivalente, el salto de temperatura para un valor ρ_1/ρ_0 dado es mucho menor que para el caso de gas ideal simple). Dicha disminución se produce a medida que se alcanza la banda de ionización, ya que, para una misma tasa de compresión ρ_1/ρ_0 , el aumento de la energía se emplea en ionizar el plasma, induciendo una disminución en el salto de temperatura con respecto al caso de gas ideal simple. Además, se observa que tanto la curva de presión (panel superior derecho) como la de temperatura (panel inferior derecho) rebasan el límite de salto inverso de densidad $\rho_0/\rho_1 = (\gamma - 1)/(\gamma + 1)$ y pasan al lado izquierdo de la asíntota vertical. Como se discutió en la [Sección 5.1.2](#), esto está relacionado con la diferencia existente entre las constantes de ionización de los estados finales con respecto al estado entrante. En la ecuación (46) se tiene que si el término constante de la derecha se hace negativo, va a provocar que la hipérbola resultante esté orientada a izquierdas, situación que se refleja en los paneles de la derecha. Las líneas auxiliares pintadas en color amarillo y verde claro representan las hipérbolas teóricas dadas por la ecuación (46), tomando las diferentes energías de ionización de los sucesivos niveles de ionización del Helio. La diferencia entre la constante de ionización en la región de HII y HeII no es lo suficientemente grande como para provocar que la hipérbola esté orientada hacia izquierdas (curva verde claro). En cambio (curva amarilla), en la zona con presencia de HII y HeIII, esta diferencia es mayor, dando lugar a que la hipérbola se aproxime a la asíntota vertical siguiendo valores de salto de densidad por encima del máximo permitido para el gas ideal simple, causando que la hipérbola esté orientada a izquierdas.

Un rasgo llamativo de la curva de Hugoniot obtenida para este caso, es que aparecen duplicidades en los valores de salto de presión y temperatura para un mismo valor de densidad post-choque. Vemos, además, que esto ocurre cuando la curva ha atravesado el valor asintótico usual para el salto de densidad, $\rho_1/\rho_0 = (\gamma + 1)/(\gamma - 1)$, sin que la presión y la temperatura se hayan ido al infinito. Las duplicidades aparecen cuando en la curva de Hugoniot se alcanzan valores de ρ_1/ρ_0 que anulan el denominador de la expresión (51) sin que le ocurra lo mismo al numerador; el cero del denominador ocurre debido a las bandas de ionización que atraviesa el gas a su paso: al haber procesos de ionización en marcha, Q_1 está por encima de la unidad, y se alcanza la verticalidad en un punto con mayor salto de densidad que en la asíntota del caso simple. Es de destacar que la existencia de curvas de Hugoniot con tramos de orientación a izquierdas (esto es, de salto de densidad decreciente para saltos de presión crecientes) es mencionada, aunque sólo brevemente, en el libro fundamental de [Landau & Lifshitz \(1987, cap 9\)](#)

También en el mapa de color de R (panel superior izquierdo) se puede ver claramente cómo a medida que se alcanza las bandas de ionización, el salto en la temperatura se ve reducido, de forma que para aumentar la temperatura el salto en presión ha de ser mucho mayor que para el caso del gas ideal simple (curva roja). Una vez se atraviesan dichas regiones, ambas curvas (roja y verde) tienden a converger a la misma situación, dado que γ en el estado entrante y los estados salientes es el mismo.

En cuanto al número de Mach entrante $M_0 = |u_0|/(c_s)_0$ (panel inferior izquierdo), observamos cómo el paso de la curva por las bandas de ionización lleva a pequeños saltos hacia arriba en M_0 . Por otro lado, vemos que la curva verde y la roja no se superponen asintóticamente para choques fuertes. Todo lo anterior se explica porque, en un choque, la energía cinética macroscópica entrante es fuente importante de energía para producir el salto. En una situación en que el gas ha de ionizarse al paso del choque, se necesita más energía cinética entrante, esto es, mayor $|u_0|$ para conseguir el mismo salto de temperatura que en el caso de gas ideal simple. Como el denominador de M_0 es el mismo en ambos casos, a saber $(c_s)_0$, lo anterior lleva a requerir un mayor número de Mach entrante para el caso con ionización variable.

5.2.3 Estado pre-choque en la región de HI y HeI en bajas densidades

Los valores post-choque para un estado entrante situado en la región de Hidrógeno y Helio neutros (HI y HeI) a bajas densidades se encuentran representados en la [Figura 5.4](#). En este caso, los estados salientes del choque están atravesando una banda importante de ionización/recombinación, la del Hidrógeno (ver panel superior izquierdo), además de las dos bandas pequeñas de ionización del Helio comentadas en los apartados anteriores. La diferencia entre las constante de ionización del estado entrante respecto de los salientes es elevada, provocando que las hipérbolas teóricas con mayores energías de ionización estén orientadas a izquierdas (paneles en la columna de la derecha). Al igual que en el caso anterior, el salto de presión disminuye con respecto al caso de gas ideal simple para un mismo valor del salto de densidad, tendiendo, sin embargo, finalmente a la misma asíntota. Mirando en detalle la curva de presión, se pueden ver pequeñas distorsiones en el rango de salto de densidad a la izquierda de la asíntota: estas deformaciones reflejan el paso de la curva por regiones con ionización variable. De igual manera, el salto de temperatura para un salto de densidad dado se ve reducido en gran medida respecto del caso del gas ideal simple, al tener que invertirse el aumento de energía interna en ionizar en vez de en aumentar la energía de agitación térmica. La presencia de duplicidades en los valores de salto de presión y temperatura vuelve a estar de manifiesto en esta situación, llegando a valores elevados de densidad post-choque, mayores al caso anterior, ya que la banda de ionización del Hidrógeno, como sabemos por los resultados de la [Sección 4.6](#), da lugar a mayores valores de Q que para las bandas de ionización del Helio.

En la figura del número de Mach, vemos el mismo efecto ya discutido en la sección anterior por el mismo motivo, pero muy amplificado: la diferencia entre números de Mach de la curva verde y roja para choques fuertes puede ser mayor de 10 unidades.

5.2.4 Estado pre-choque en la región de HI y HeI en altas densidades

Una situación similar al caso anterior se presenta en la [Figura 5.5](#), pero para un estado entrante con una densidad mucho mayor. Una diferencia importante es el hecho de que, en este caso, la banda de la primera ionización del He se superpone con la del Hidrógeno. Esto se traduce en que no va a haber ninguna gran alteración en las curvas del salto de presión, temperatura y número de Mach debido a la ionización del Helio. No apreciamos grandes diferencias cualitativas en las curvas de salto de presión, temperatura o del número de Mach respecto del caso de baja densidad tratado antes a pesar de la gran diferencia, de unos tres órdenes de magnitud, en los valores de entrada de la presión (y similar para la temperatura).

5.2.5 Estado pre-choque en la región de H_2 y HeI

Para finalizar este estudio, se han calculado los valores de salida del choque para un estado entrante situado en la región de H molecular, los cuales se encuentran representados en la [Figura 5.6](#). La curva de posibles estados post-choque atraviesa todas las bandas de ionización presentes en la EDE de Bifrost, siendo por tanto de gran interés. Además, es el único caso en el que $\gamma_0 \neq \gamma_1$: de hecho, $\gamma_0 = 4/3$ y $\gamma_1 = 5/3$. El estado de entrada se ha escogido de forma que los estados salientes sean lo más próximos posibles a los regímenes normales de atmósfera solar.

Un aspecto de importancia, que sólo se encuentra en esta situación, es el resultado dado por la ecuación (47), a saber, que el salto de densidad asintótico sólo depende de γ_1 . Si se pensara en términos de gas ideal simple en el que γ no cambia, se podría llegar a un resultado erróneo: el salto límite de densidad depende del estado final y no del estado inicial. En los paneles de la columna de la derecha se visualiza este efecto claramente. Por otro lado, las curvas teóricas para las distintas constantes de ionización (amarilla, verde claro, azul oscuro y magenta) convergen al mismo límite, ya que el valor de γ_1 para todas esas regiones post-choque es el mismo, $\gamma_1 = 5/3$. La presencia de valores múltiples para los saltos de presión y temperatura en un rango del salto de densidad vuelve a ser evidente, siendo en este caso mucho más acentuada, al tener hasta cuatro valores que corresponden al mismo salto de densidad. Esto es debido a que el denominador de (51) atraviesa tres ceros sucesivamente mientras que el numerador mantiene su signo, y todo esto ocurre al atravesar la curva de Hugoniot las sucesivas bandas de disociación del Hidrógeno molecular e ionización del Hidrógeno neutro.

A través del mapa de color de R (panel superior izquierdo), se visualiza cómo al atravesar la banda de disociación de H_2 hay que aumentar en mucho el salto de presión para conseguir aumentar el salto de temperatura; esto, análogamente a los casos anteriores es porque el aumento de energía interna de los elementos de gas al paso del choque se invierte en disociar la molécula de H en vez de en aumentar la energía de agitación térmica. Siguiendo la curva hacia mayores saltos, nos encontramos con la banda de ionización del H, donde aparece de nuevo con el mismo efecto.

En la figura del número de Mach (panel inferior izquierda), se pueden observar dos subidas bruscas del M_0 , que coinciden con el paso de la curva de Hugoniot por las bandas de disociación del H molecular e ionización del H. La subida que se produce en la banda de ionización del H es mucho mayor que el del H molecular: la energía involucrada en la ionización del H es mucho mayor que la necesaria para disociar las moléculas de H_2 (ver [Tabla 4.2](#)), luego los cambios en energía cinética entrante son mayores en el primer caso que en el segundo.

5.3 Entropía

Como se ha mencionado al comienzo de esta sección, una condición necesaria para que un choque se produzca es que la entropía debe aumentar a lo largo del choque. Por medio de los mapas de entropía determinados en la [Sección 4.4](#), es posible hacer un cálculo de las entropías post-choque, y comprobar de esta forma que la entropía aumenta, siendo físicamente posibles todos los casos presentados. En la [Figura 5.7](#) se muestran los resultados para cuatro de los cinco casos anteriores, pudiendo comprobarse que esta condición se cumple.

Es interesante ver el efecto que producen las bandas de ionización y disociación molecular en las variaciones de entropía. En estas regiones, es necesario que se produzca un considerable aumento de entropía al paso del choque para que la temperatura aumente. Esto es coherente con lo dicho anteriormente: al estar ocurriendo un cambio de estado, la energía aportada se invierte en ionizar (o disociar moléculas) preferentemente, con lo que el aumento de temperatura, esto es de energía de agitación térmica, se reduce considerablemente en términos relativos.

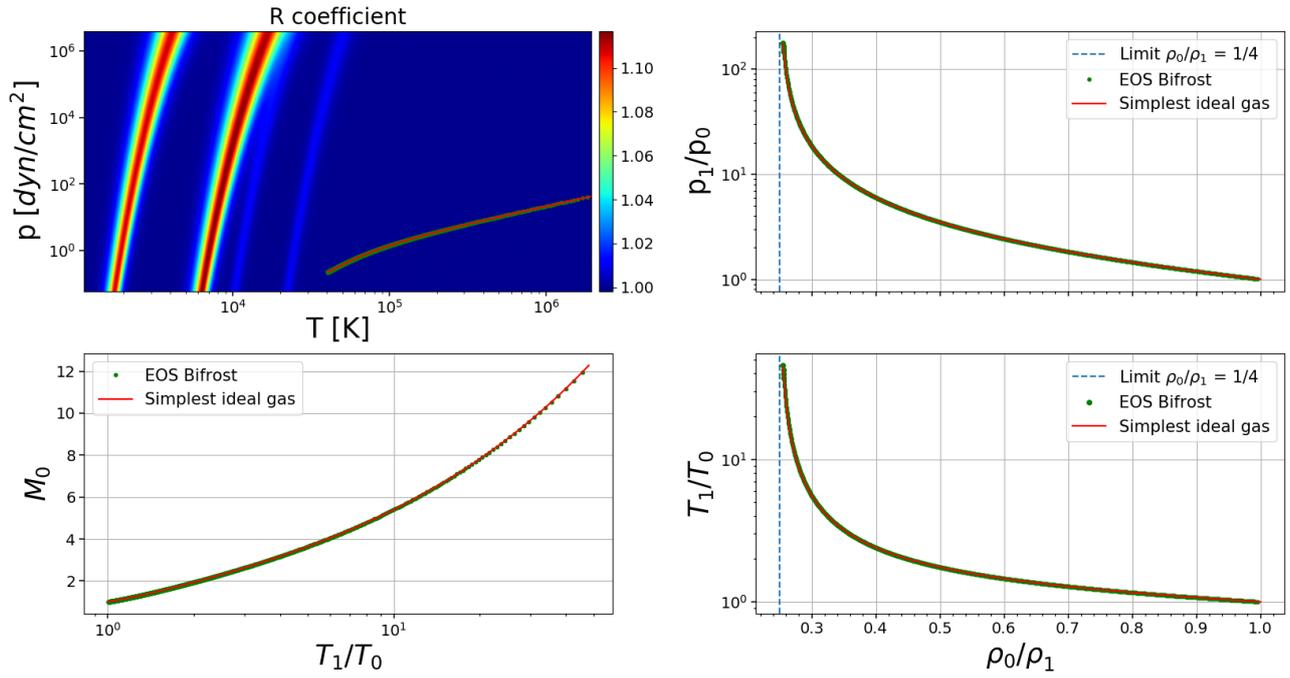


Figura 5.2: Región pre-choque HII y HeIII.

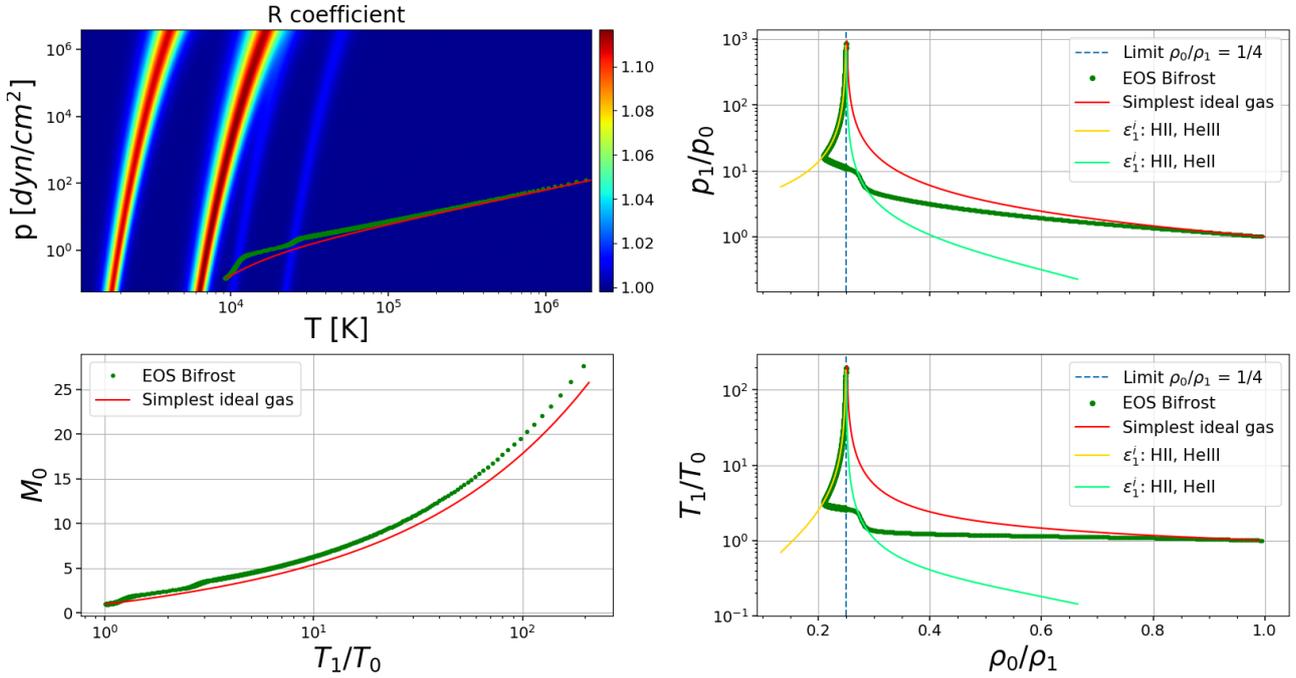


Figura 5.3: Región pre-choque HII y HeI

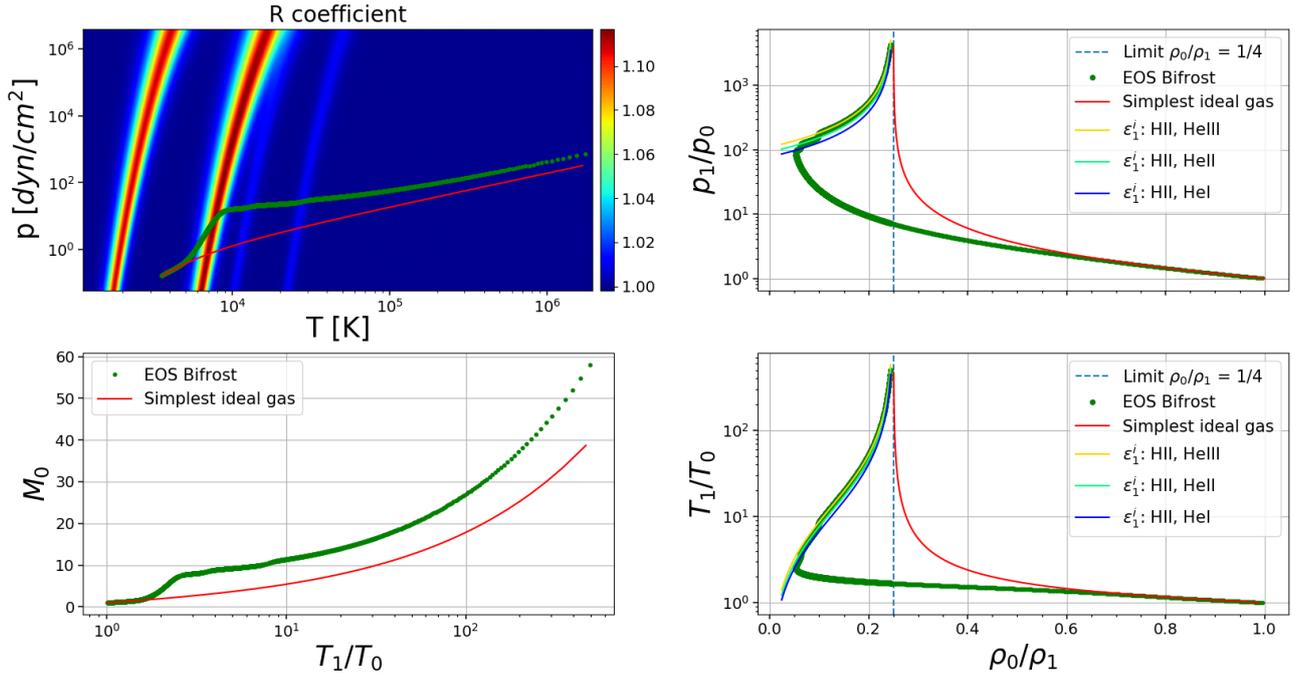


Figura 5.4: Región pre-choque HI y HeI en bajas densidades.

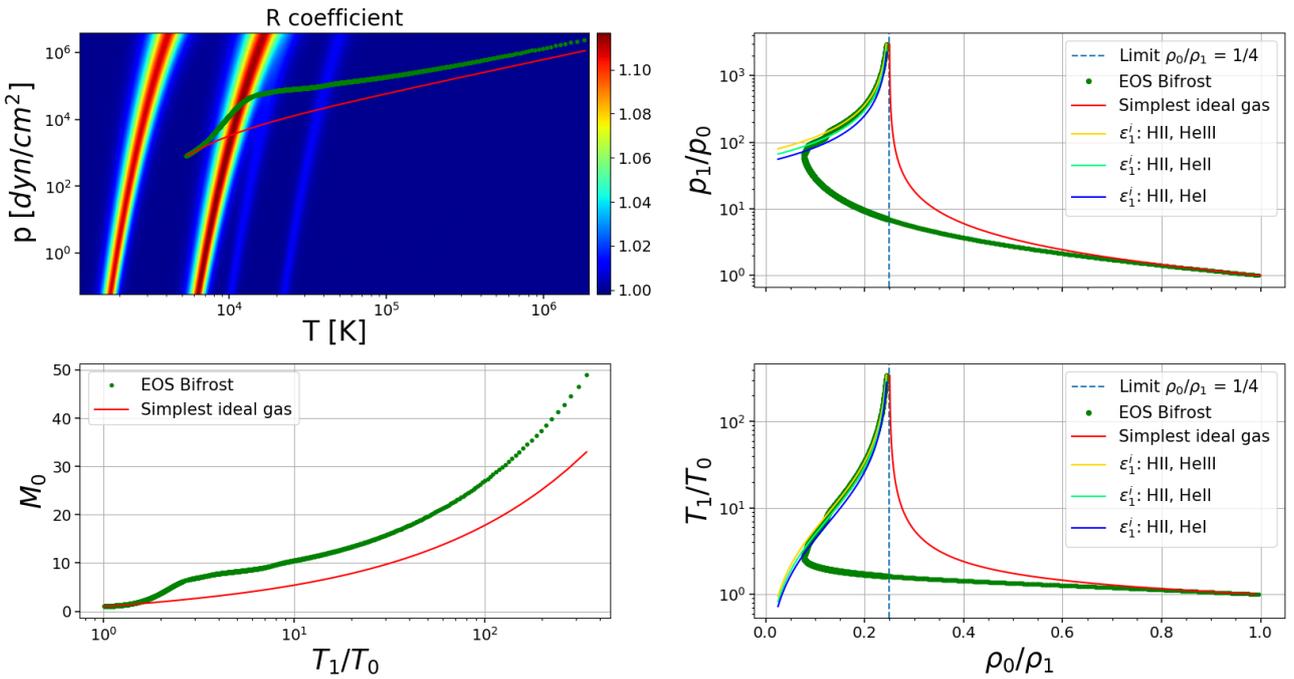


Figura 5.5: Región pre-choque HI y HeI en altas densidades.

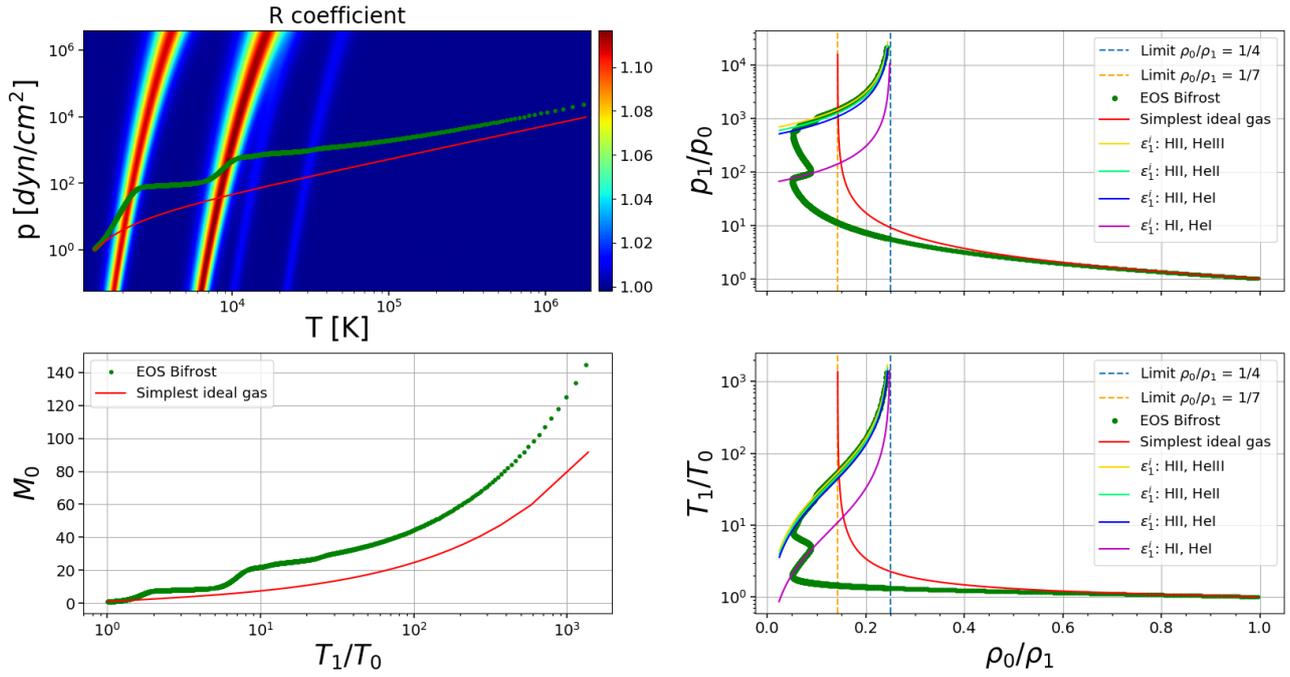


Figura 5.6: Región pre-choque H_2 y Hel

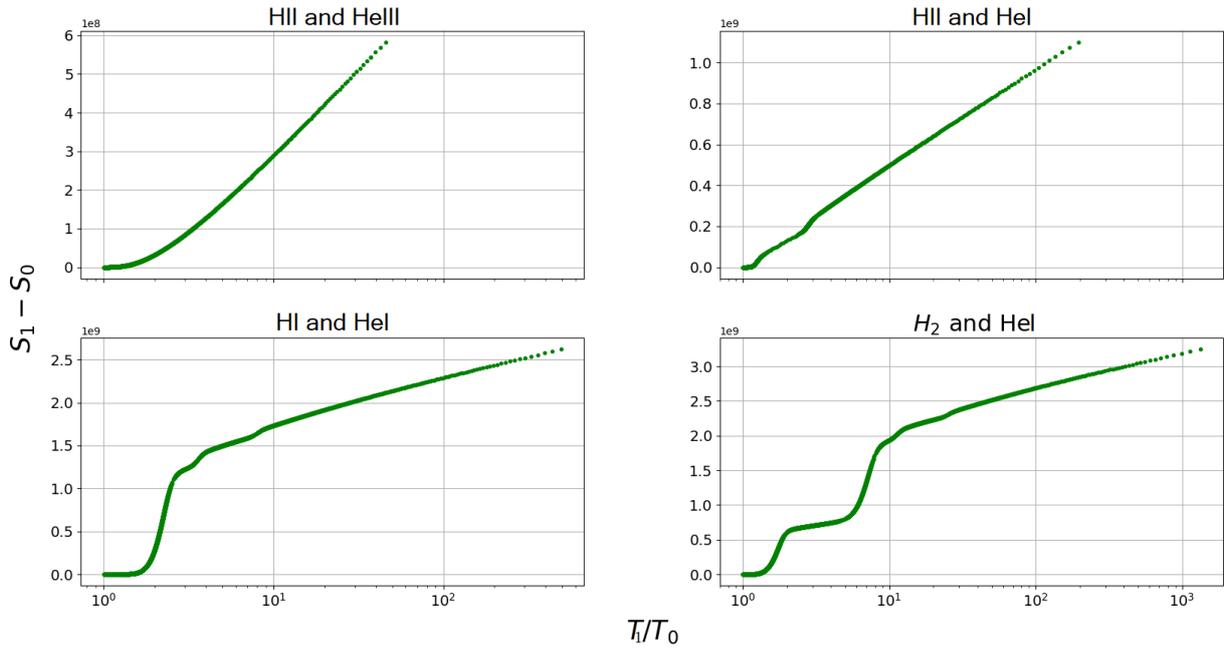


Figura 5.7: Entropías post-choque.

6 Conclusiones

The results obtained from the characterization and the study of the shocks in the Bifrost EOS are recovered, concluding that this study has been carried out successfully and suggesting future possible developments related to this EOS.

En este trabajo se ha llevado a cabo una amplia caracterización de la ecuación de estado de Bifrost, habiéndose obtenido abundante información, en un rango extenso de energías internas y densidades, acerca de las propiedades termodinámicas del gas descrito por ella. Se ha estudiado en qué rangos de las variables termodinámicas la masa atómica por partícula μ y los calores específicos tienen valores distintos de los propios de gases ideales simples, esto es, de aquellos gases ideales en que no tienen lugar procesos de ionización/recombinación ni de disociación/formación molecular. Se han calculado mapas de entropía en función de temperatura y presión, realizando una comparación con los resultados obtenidos por otro código numérico con una EDE distinta, con resultados satisfactorios. Además, se ha obtenido una forma analítica para la energía interna por unidad de masa que incluye los procesos de formación molecular del Hidrógeno y de ionización del Hidrógeno y del Helio. Se ha comprobado su validez haciendo tests en regiones en las que la composición química del gas no varía. Esta expresión de la energía interna puede ser de utilidad también en casos más generales determinando las fracciones de ionización y disociación mediante la ecuación de Saha-Boltzmann.

Además de lo anterior, se han calculado los coeficientes de ionización R y Q , que aportan valiosa información sobre las bandas de ionización de HI, HeI y HeII, así como de la disociación del H_2 , en un mapa de coordenadas presión y temperatura. También se ha calculado γ , dando cuenta de que no alcanza el valor de $5/3$ (ó $4/3$) en todas las regiones en que habríamos esperado comportamiento como gas ideal simple basándose en la uniformidad de μ ; este efecto es especialmente marcado en la región en que el Helio está en la forma HeII. Por otro lado, se ha determinado la velocidad del sonido, c_s , en toda la tabla de ecuación de estado, observando desviaciones importantes respecto del caso del gas ideal simple en las bandas de ionización o disociación molecular, en el sentido de determinar cuánto disminuye c_s en esas zonas como consecuencia de dichos procesos de cambio de composición. Los resultados pueden ser interesantes a la hora de estudiar la formación de frentes de choque en esas regiones. Finalmente, se ha relacionado lo anterior con los conocidos coeficientes adiabáticos de Chandrasekhar Γ_1 y Γ_2 , utilizados en la teoría de interiores estelares.

En la segunda parte del trabajo se ha llevado a cabo un estudio de los saltos de choque que permite la EDE de Bifrost, habiéndose encontrado algunos resultados que no esperábamos. Cuando se producen choques en los que tienen lugar procesos de ionización o disociación molecular, cambia mucho la visión que se tiene a partir de las expresiones teóricas elementales. Cuando los valores post-choque en la curva de Hugoniot se encuentran en esas regiones, las propiedades del choque adquieren aspectos propios de los choques isotermos: un aumento del salto de presión requiere un salto de densidad mucho mayor del normal de los choques elementales. En el trabajo se han calculado expresiones analíticas para aquellos casos en que la curva de Hugoniot atraviesa, rebasándolas, dichas regiones. Dependiendo del tamaño del cambio en la energía interna de ionización (o disociación molecular) entre el estado entrante y el estado saliente del choque, se puede obtener una inversión del signo de la hipérbola en el sentido de que un aumento del salto de presión se consigue con disminución del salto de densidad. Finalmente, se ha estudiado la curva de Hugoniot predicha por la EDE de Bifrost para cinco casos concretos de estado pre-choque de interés solar.

Como posibles extensiones de este trabajo en el futuro nos gustaría mencionar un estudio más a fondo de la integral de la entropía y de las razones para las discrepancias que hemos encontrado en sus derivadas segundas cruzadas. En cuanto al estudio de choques, un tema de interés es el que se refiere a la inestabilidad de corrugación. Hemos comenzado este estudio, y llegado a primeros resultados que confirman la estabilidad de los choques estudiados en este trabajo, pero aún queda trabajo por hacer.

Bibliografía

- Arber, T. D., Longbottom, A. W., Gerrard, C. L., & Milne, A. M. 2012, Lare3d: Lagrangian-Eulerian remap scheme for MHD
- Carlsson, M., Hansteen, V. H., Gudiksen, B. V., Leenaarts, J., & De Pontieu, B. 2016, *Astron. Astrophys.*, 585, A4
- Chandrasekhar, S. 1939, *An introduction to the study of stellar structure* (Univ. of Chicago Press)
- Courant, R., & Friedrichs, K. O. 1948, *Supersonic flow and shock waves* (Interscience Publishers, New York)
- DeVore, C. R., & Antiochos, S. K. 2008, *The Astrophysical Journal*, 680, 740
- Fan, Y., & Gibson, S. E. 2003, *Astrophys. J. Lett*, 589, L105
- Freytag, B., Steffen, M., Ludwig, H. G., et al. 2012, *Journal of Computational Physics*, 231, 919
- Gudiksen, B. V., Carlsson, M., Hansteen, V. H., et al. 2011, *Astron. Astrophys.*, 531, A154+
- Gustafsson, B., Bell, R. A., Eriksson, K., & Nordlund, A. 1975, *Astron. Astrophys.*, 500, 67
- Hegglund, L., De Pontieu, B., & Hansteen, V. H. 2007, *Astrophys. J*, 666, 1277
- Hegglund, L., Hansteen, V. H., De Pontieu, B., & Carlsson, M. 2011, *Astrophys. J*, 743, 142
- Khomenko, E., Vitas, N., Collados, M., & de Vicente, A. 2018, *Astron. & Astrophys*, 618, A87
- Landau, L. D., & Lifshitz, E. M. 1987, *Course of Theoretical Physics. Vol 6, Fluid Mechanics*, 2nd edition (Elsevier)
- Nóbrega-Siverio, D., Moreno-Insertis, F., & Martínez-Sykora, J. 2016, *The Astrophysical Journal*, 822, 18
- Nóbrega-Siverio, D., Moreno-Insertis, F., Martínez-Sykora, J., Carlsson, M., & Szydlarski, M. 2020, *Astron. Astrophys.*, 633, A66
- Nordlund, A., & Galsgaard, K. 2007, *A 3D MHD Code for Parallel Computers* (Technical Report, Niels Bohr Institute)
- Nordlund, Å., Stein, R. F., & Asplund, M. 2009, *Living Reviews in Solar Physics*, 6, 2
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P. 1992, *Numerical recipes in FORTRAN. The art of scientific computing* (Cambridge University Press)
- Takasao, S., Isobe, H., & Shibata, K. 2013, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 65, 62
- Vögler, A. 2003, Ph.D. Thesis (University of Göttingen, Germany)
- Zel'dovich, Y. B., & Raizer, Y. P. 1967, *Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena* (Academic Press Inc., New York)