



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE POSGRADO EN ASTROFÍSICA
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

**SIMULACIONES NUMÉRICAS DE
REMANENTES DE SUPERNOVA
ASIMÉTRICOS**

TESIS

**QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (ASTROFÍSICA)**

**PRESENTA:
JUAN CLAUDIO TOLEDO ROY**

**TUTORES:
DR. PABLO FABIÁN VELÁZQUEZ BRITO
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES
DR. JOSÉ ALEJANDRO ESQUIVEL SALAZAR
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES**

MÉXICO, D. F. ABRIL 2014



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas

Tesis Digitales

Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©

PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

*A mis padres, quienes son los pilares sobre los cuales descansa mi cosmos, y a Ariadna,
quien es mi sol.*

Agradezco de todo corazón a mis asesores, Pablo Velázquez y Alejandro Esquivel, quienes han sido al mismo tiempo mis maestros, mis tutores, mis colegas, mis guías, mis colaboradores, y por encima de todo, mis amigos.

Agradezco también profundamente a Alejandro Raga, Ary Rodríguez, Liliana Martínez, Fabio de Colle, entre otros, por haber contribuido a crear un ambiente de trabajo y convivencia inmejorable a través de su gran calidad humana y por haberme dejado formar parte de sus vidas fuera del instituto.

Naturalmente, agradezco a mi familia, pues sin ellos nada de esto hubiera sido posible: a mis padres Juan Antonio y Françoise, por haberme cobijado durante toda una vida con comprensión, enseñanza y amor; a mis hermanos Micael, Leilani y Samira, por ser maravillosos compañeros de vida de quienes estoy muy orgulloso; a Ariadna, por ser una pareja que me ha querido y apoyado incondicionalmente; a mi nueva familia, Guillermina y Fernando, por haberme aceptado con amor como uno de ellos; a mis tíos Lila y Nacho, quienes me recibieron en esta gran ciudad con los brazos y el corazón abiertos; a mis primos Novelli y Daniela con quienes compartí tantos momentos de juventud.

Por último, pero no por ello menos importante, quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México, por haber sido mi casa adoptiva y mi hogar por estos años, por haberme brindado la oportunidad de estudiar un posgrado de calidad internacional, y por haberme permitido participar en la vida docente. Agradezco también al Programa de Becas de Posgrado de CONACyT, así como al proyecto PAPIIT IN105312, por haberme brindado el apoyo económico necesario para llevar a cabo mis estudios.

“Si las puertas de la percepción se depurasen, todo aparecería a los hombres como realmente es: infinito. Pues el hombre se ha encerrado en sí mismo hasta ver todas las cosas a través de las estrechas rendijas de su caverna.”

William Blake

Las bodas del cielo y el infierno (1793)

Resumen

Los remanentes de supernova (RSN) son de gran importancia pues definen la morfología, dinámica y metalicidad del medio interestelar. Aunque es natural esperar que una explosión de supernova produzca un remanente esférico, en la práctica muchos RSNs presentan características asimétricas, y el origen de estas complejas morfologías constituye un campo interesante de estudio. La presente tesis doctoral se centró en el modelado de las asimetrías en RSNs a través de simulaciones hidrodinámicas.

Se comenzó estudiando los modelos analíticos canónicos de la evolución de RSNs, los cuales fueron establecidos en trabajos pioneros de Sedov y Taylor, y posteriormente ampliados por Chevalier, Truelove y McKee, entre muchos otros. Esto permite establecer restricciones observacionales a los modelos numéricos de RSNs. Por ejemplo, un resultado interesante es que es posible conectar el radio y velocidad de expansión de un remanente, cantidades que son determinables observacionalmente, con la densidad del medio ambiente circundante (cuyo valor puede estimarse en muchas ocasiones) y la energía inicial de la explosión. Las expresiones analíticas derivadas de estos modelos sirvieron como base de comparación para validar los resultados numéricos.

El proyecto de doctorado estuvo en parte fundamentado en la experiencia previa obtenida del estudio numérico del remanente asimétrico DEM L316, el cual se publicó en 2009 (Toledo-Roy et al. 2009). En este estudio, se empleó el código hidrodinámico 2D MEXCALC para modelar este remanente de doble cáscara como el resultado de la interacción de dos explosiones de supernova cercanas. Se usaron los resultados numéricos para producir mapas sintéticos de rayos X y se compararon estos mapas con las observaciones. Se determinó que una colisión entre los remanentes produciría un aumento de casi dos órdenes de magnitud en el flujo de rayos X. Puesto que esto contradice lo observado, se concluyó que las cáscaras del remanente no deben estar actualmente en contacto físico.

Para poder abordar una gama más amplia de modelos numéricos, un objetivo principal del proyecto de doctorado fue el desarrollo del código hidrodinámico tridimensional WALICXE3D. Este nuevo código resuelve las ecuaciones de Euler de la hidrodinámica mediante el método de volúmenes finitos de Godunov, extendido a segundo orden y empleando los algoritmos HLL y HLLC para la solución aproximada del problema de Riemann. El código implementa la técnica de malla adaptiva (Adaptive Mesh Refinement) y está paralelizado mediante la librería MPI por lo que puede ejecutarse mediante procesos paralelos en un *cluster* de cómputo. El funcionamiento del código fue validado realizando pruebas numéricas estándares en 1D y 3D que tienen soluciones analíticas. También se estudiaron aspectos técnicos de desempeño como el escalamiento paralelo y se obtuvieron resultados satisfactorios.

Durante el proyecto de doctorado se realizaron estudios numéricos de dos remanentes asimétricos empleando WALICXE3D.

El primero fue el remanente Galáctico G352.7-0.1, el cual es peculiar pues presenta múltiples cáscaras en longitudes de onda de radio y al mismo tiempo emisión centralizada en rayos X. Se modeló este RSN como el resultado de una explosión de supernova única que ocurre al interior de una nube cuya densidad es más elevada que la del medio ambiente circundante. El remanente se expande hasta el borde de la nube y entonces parte del material se desborda al medio interestelar.

Para poder comparar las simulaciones con las observaciones en longitudes de onda de radio, se modificó WALICXE3D añadiendo la ecuación de inducción electromagnética a las ecuaciones hidrodinámicas y advectando un campo magnético “pasivo” junto con el fluido. Este tratamiento se justifica en vista de que el campo magnético no es dinámicamente importante para este objeto, y se evita de esta manera la necesidad de un tratamiento MHD completo. Puesto que existe actualmente un debate en la literatura sobre cuál es el mecanismo más eficiente en la producción de emisión sincrotrón en choques de RSNs, los mapas sintéticos generados fueron generados empleando los dos paradigmas principales.

Se encontró que es posible obtener múltiples cáscaras en radio a través de este modelo. Es importante recalcar que la apariencia observada en radio puede cambiar drásticamente dependiendo de la orientación del objeto con respecto a la línea de visión, lo cual confirma resultados anteriores. Por otro lado, el modelo reproduce correctamente la morfología de centro lleno en rayos X, lo cual es consistente con la edad estimada del remanente.

Este trabajo se encuentra ya publicado en Monthly Notices of the Royal Astronomical Society (Toledo-Roy et al. 2013).

El segundo remanente asimétrico que se estudió fue el remanente de Kepler, el cual es producto de la supernova observada por Johannes Kepler en 1604. Este trabajo se encuentra ya completo y será enviado próximamente. El origen de este remanente ha sido difícil de explicar, pues existe evidencia observacional tanto a favor de una estrella progenitora masiva como evidencia que sugiere una explosión de tipo Ia.

Con el fin de modelar este remanente, se retomó la propuesta de que el sistema progenitor del remanente de Kepler era un sistema binario *runaway*, compuesto por una estrella en fase AGB y una enana blanca que acreta material de la primera. Debido a la alta velocidad del sistema con respecto al medio interestelar, el viento de la estrella AGB produce una estructura con un choque a proa y modifica substancialmente el medio en el cual ocurre la explosión.

Aprovechando las capacidades 3D de WALICXE3D, se propuso que el viento de la estrella AGB es anisotrópico, lo cual ha sido sugerido en algunas observaciones de vientos AGB. Además, permitimos que el eje polar de la estrella tuviera una inclinación con respecto a la dirección de movimiento del sistema con respecto al medio interestelar.

Se analizaron cuatro modelos con distintos parámetros del viento AGB y del medio ambiente. Se simuló primero la formación de la burbuja del viento AGB, y posteriormente se introdujo un RSN cuyas propiedades son consistentes con una explosión de tipo Ia. La interacción del viento AGB con el medio ambiente produce una compleja estructura que es susceptible a la inestabilidad Kelvin-Helmholtz, por lo que la burbuja en la cual se expande inicialmente el remanente es altamente asimétrica.

Analizando los mapas de rayos X sintéticos generados con las simulaciones, encontramos que uno de los modelos produce una estructura que es similar a la observada, reproduciendo tanto la zona brillante al noroeste del remanente como una barra transversal que lo cruza aproximadamente de noroeste a sureste. La luminosidad total en rayos X obtenida se encuentra solamente a un factor dos por debajo del valor observado. El modelo también reproduce otras características observadas, como el diámetro del RSN y los valores atípicos del parámetro de expansión en algunas zonas del remanente. Finalmente, la evolución temporal de la luminosidad obtenida también coincide aproximadamente con la tasa de decaimiento observada en décadas recientes.

Con esta tesis de doctorado se pretende haber contribuido al entendimiento del origen de las asimetrías en estos remanentes de supernova. Además, estos trabajos demostraron la capacidad del código WALICXE3D y lo consolidaron como una herramienta computacional que podrá ser utilizada en el futuro para el estudio de una gran variedad de problemas astrofísicos.

Índice general

1. Remanentes de Supernova	1
1.1. Introducción	1
1.2. Modelo Analítico de Evolución	8
1.3. Pruebas y Aplicaciones Numéricas	18
1.3.1. Inicialización de Remanentes	20
1.3.2. Comparación con el Modelo Analítico	21
1.3.3. Pruebas de Convergencia	23
1.3.4. Colisión de Dos Remanentes	26
2. El código Walicxe3D	34
2.1. Descripción General	34
2.2. Integrador Numérico	39
2.2.1. Método de Godunov	40
2.2.2. El algoritmo de Riemann aproximado HLL	43
2.2.3. El algoritmo HLLC	44
2.2.4. Extensión a segundo orden	46
2.2.5. Viscosidad artificial	48
2.2.6. Enfriamiento radiativo	49
2.3. Malla Adaptiva	51
2.3.1. Refinamiento y desrefinamiento	52
2.3.2. Sistema de identificadores universales (bIDs)	55
2.3.3. Condiciones de frontera	61
2.4. Paralelismo	62
2.5. Procesamiento de Datos	64

2.6.	Pruebas	66
2.6.1.	Tubos de choque	66
2.6.2.	Pruebas en 3D	70
2.6.3.	Impacto de la Paralelización y de la Malla AMR	72
3.	A blowout numerical model for the supernova remnant G352.7-0.1	83
3.1.	Introduction	84
3.2.	The blowout model	86
3.3.	Numerical simulations	89
3.3.1.	Numerical Method	89
3.3.2.	Initial conditions	91
3.3.3.	Calculation of the synchrotron emission	93
3.3.4.	Calculation of the thermal X-ray emission	95
3.4.	Results	95
3.5.	Conclusions	100
4.	A 3D numerical model for Kepler's SNR	106
4.1.	Introduction	107
4.2.	The model	110
4.3.	Numerical simulations	112
4.3.1.	Numerical Method	112
4.3.2.	Calculation of the thermal X-ray emission	114
4.3.3.	Initial conditions: precursor AGB wind	115
4.3.4.	Initial conditions: supernova remnant	118
4.4.	Results	120
4.5.	Discussion	124
4.6.	Conclusions	128
5.	Conclusiones	134
A.	El remanente de doble cáscara DEM L316	139
A.1.	Introducción	139
A.2.	Modelo Numérico	142

A.3. Resultados	145
A.4. Conclusiones	148

Índice de figuras

1.1. Ejemplos de la clasificación morfológica de remanentes de supernova.	3
1.2. Estructura de doble choque típica de un RSN.	4
1.3. Fases evolutivas de un RSN	6
1.4. Función de enfriamiento representativa para gas en equilibrio coronal	12
1.5. Posición del choque como función del tiempo	16
1.6. Mapas de densidad de una simulación numérica de un remanente “típico”	22
1.7. Perfiles radiales de densidad de un remanente simulado	23
1.8. Comparación entre la predicción analítica y resultados numéricos	24
1.9. Impacto en la evolución del remanente de cambiar la masa inyectada inicial	25
1.10. Impacto en la evolución del remanente de variar la distribución de energía	25
1.11. Impacto en la evolución del remanente de cambiar el radio de la región de inyección	26
1.12. Dos remanentes de supernova en el caso <i>non-merged</i> (Ikeuchi 1978)	27
1.13. Mapa de densidad del modelo SN01	28
1.14. Mapa de densidad del modelo SN02	29
1.15. Mapa de densidad del modelo SN03	29
1.16. Mapa de densidad del modelo SN04	30
2.1. Comparación del desempeño de varios códigos hidrodinámicos de uso común	35
2.2. Diagrama de flujo general del código WALICXE3D	38
2.3. Promedio espacial de las variables conservadas sobre una <i>celda</i>	41
2.4. Solución general del problema de Riemann para las ecuaciones de Euler	42
2.5. Esquema de la solución aproximada HLL para el problema de Riemann	43
2.6. Esquema de la solución aproximada HLLC para el problema de Riemann	45
2.7. Explicación del propósito del <i>slope limiter</i>	47

2.8. Funciones de enfriamiento de Walicxe3D	50
2.9. Estructura de datos básica de WALICXE3D	51
2.10. Ejemplo de refinamiento de la malla adaptiva	53
2.11. Estructura de árbol correspondiente a un refinamiento de la malla	53
2.12. Ejemplo de la restricción al nivel de refinamiento de bloques vecinos	55
2.13. Ejemplo del sistema de bIDs	58
2.14. Primeras 6 iteraciones de la construcción de la curva de Hilbert en 2D	63
2.15. Ejemplo de la partición del dominio computacional entre 6 procesos	65
2.16. Resultados de la Prueba 1, el tubo de choque de Sod	67
2.17. Resultados de la Prueba 2	68
2.18. Resultados de la Prueba 3	69
2.19. Resultados de la Prueba 4	69
2.20. Cortes bidimensionales de la densidad para el tiempo $t = 10$ kyr	71
2.21. Evolución temporal de la posición del choque	72
2.22. Perfiles de densidad, velocidad y presión detrás del choque principal	73
2.23. Rendimiento paralelo como función del número de procesos	75
2.24. Desglose de los tiempos de ejecución en una iteración	76
2.25. Simulaciones de prueba variando el tamaño de los bloques	78
2.26. Comparación de mallas	80
3.1. Composite (radio and X-ray) image of G352.7-0.1	87
3.2. Schematic diagram of the initial conditions	88
3.3. Evolution of the shock radius versus time	93
3.4. Density evolution	96
3.5. Synthetic synchrotron maps	97
3.6. Simulated X-ray map	99
3.7. Composite with synthetic X-rays and synchrotron (quasi-per)	101
3.8. Composite with synthetic X-rays and synchrotron (quasi-par)	102
4.1. Radio and xray image of Kepler's SNR	108
4.2. Density and velocity profiles as a function of polar angle	111
4.3. A schematic representation of the initial setup for the AGB wind phase	113
4.4. Evolution of the AGB wind for Model B	115

4.5.	A comparison of the AGB wind structures at $t = 500$ kyr for the four models	117
4.6.	Evolution of the supernova remnant for Model B	119
4.7.	Comparison of the SNRs for the four models at $t = 400$ yr	121
4.8.	Synthetic X-ray maps in the range 2–10 keV	122
4.9.	Time evolution of the total X-ray luminosity for the four models. The thick continuous lines correspond to emission coefficients computed using the metal enhancements of Kinugasa & Tsunemi (1999), while the thin dashed lines were obtained with a higher metallicity of $Z = 3$ solar (see text). The letter label between each pair of curves indicates the model.	126
4.10.	X-ray emission map corresponding to Model B for a rotation angle of 70° , represented with a color map and scale similar to the <i>Chandra</i> observation (compare to Fig. 4.1b). The color bar is given in units of $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{sr}^{-1}$.	127
A.1.	Imagen en $\text{H}\alpha$ de DEM L316	140
A.2.	Imagen de Chandra de DEM L316 en tres bandas	141
A.3.	Esquema de los dos escenarios en el modelo de DEM L316	143
A.4.	Mapas de densidad simulada para el caso <i>con colisión</i>	146
A.5.	Mapas de densidad simulada para el caso <i>sin colisión</i> ,	147
A.6.	Emisión de rayos X simulada para el caso <i>con colisión</i>	149
A.7.	Emisión de rayos X simulada para el caso <i>sin colisión</i>	150

Índice de tablas

1.1. Resumen de parámetros de los cuatro modelos con dos remanentes	28
2.1. <i>Slope limiters</i> habilitados en WALICXE3D	48
2.2. Resultados de la prueba variando el tamaño de los bloques	79
4.1. Wind parameters for the numerical models	115
4.2. Total X-ray luminosity (L_X) and mass of the X-ray emitting gas (M_X) for all four models at $t = 400$ yr. The lower luminosity values (second row) were obtained assuming a metallicity $Z = 3$ solar (see text). The mass of X-ray emitting gas is the same in both cases.	125
A.1. Descripción de los modelos numéricos para DEM L316	145

Capítulo 1

Remanentes de Supernova

1.1. Introducción

El estudio de los remanentes de supernova (RSN) constituye un tema de interés central para la comunidad astrofísica. Las explosiones de supernova y el remanente que dejan detrás son de gran importancia para varios procesos que definen la morfología, dinámica y metalicidad del medio interestelar. Además, constituyen una fuente principal de energía para el medio interestelar (e.g., Elmegreen & Scalo 2004), son elementos clave en el proceso de retroalimentación estelar que promueve la formación estelar (e.g, McKee & Ostriker 2007), y son una fuente posible de rayos cósmicos (e.g., Berezhko & Volk 2007).

Un RSN resulta de la interacción entre el material eyectado violentamente por la explosión de supernova de la estrella que llamamos progenitora y el medio ambiente interestelar que existía previo a la explosión. Puesto que este material eyectado se mueve con velocidades muy superiores a la velocidad del sonido en el medio ambiente circundante, esto resulta en una onda de choque hidrodinámica que se propaga en el medio ambiente.

Como los detalles del proceso que conduce a una explosión supernova no se comprenden aún totalmente, y también debido a que no es sencillo determinar el origen de un RSN a partir de sus propiedades observacionales, la clasificación de los RSNs se ha hecho históricamente con base en su morfología, y es independiente de la clasificación de supernovas. La mayoría de los RSNs pueden agruparse actualmente en tres categorías principales (Vink 2012):

- (i) Remanentes de *tipo cáscara*, en los cuales la emisión está dominada por la zona del

choque. La cáscara es claramente visible en radiocontinuo (emisión sincrotrón) y en rayos X debido a las altas temperaturas, y tiene usualmente una apariencia anular debido al abrillantamiento al limbo. Ejemplos bien estudiados de esta categoría son los remanentes de Tycho (ver Fig. 1.1a), de Kepler y Cassiopeia A.

- (II) Remanentes *pleriónicos*, cuya actividad interior está impulsada por la actividad de un pulsar central o una estrella de neutrones. La región alrededor del pulsar (denominada *pulsar wind nebula*) está poblada por electrones relativistas, lo cual produce emisión de radiación sincrotrón y hace que la estructura interna del remanente sea la que domine la morfología observada. La palabra “plerión” proviene del griego *pleres* y quiere decir “lleno”. El ejemplo prototípico es la Nebulosa del Cangrejo (ver Fig. 1.1b).
- (III) Remanentes de *morfología mixta* (o *compuestos*), que presentan apariencias distintas en diferentes partes del espectro electromagnético. Se reconocen actualmente dos subcategorías. En la primera, los pleriónicos, una nebulosa impulsada por un pulsar joven se encuentra aún rodeada por una cáscara visible. Un ejemplo claro es el remanente KES 75 (ver Fig. 1.1c). Más recientemente se ha identificado una segunda subcategoría: los denominados “compuestos térmicos” (*thermal composites*), e.g. Rho & Petre 1998. Éstos presentan una apariencia de cáscara en el radio y emisión centralizada en rayos X, pero a diferencia de los compuestos pleriónicos, la emisión central no es causada por la presencia de un pulsar, sino que es emisión térmica proveniente de plasma caliente. Algunos ejemplos de esta categoría son los RSNs W44, 3C 400.2, y W28.

La evolución de los RSNs puede caracterizarse por tres fases dinámicamente distintas (Woltjer 1972, Chevalier 1977). La primera fase, la de *expansión libre*, inicia cuando el material de la estrella progenitora es eyectado por la explosión con velocidades mucho mayores a la velocidad del sonido en el medio ambiente. Esto produce una onda de choque supersónica que se propaga a través del medio ambiente, acelerando y comprimiendo el gas a su paso; a esta onda de choque le llamamos el *choque principal*. Al encontrarse con este gas chocado, el material eyectado por la explosión es desacelerado y también comprimido, lo que produce un segundo choque al interior del remanente, el cual denominamos *choque de reversa*. Entre estos dos choques, una discontinuidad de contacto separa al gas ambiente

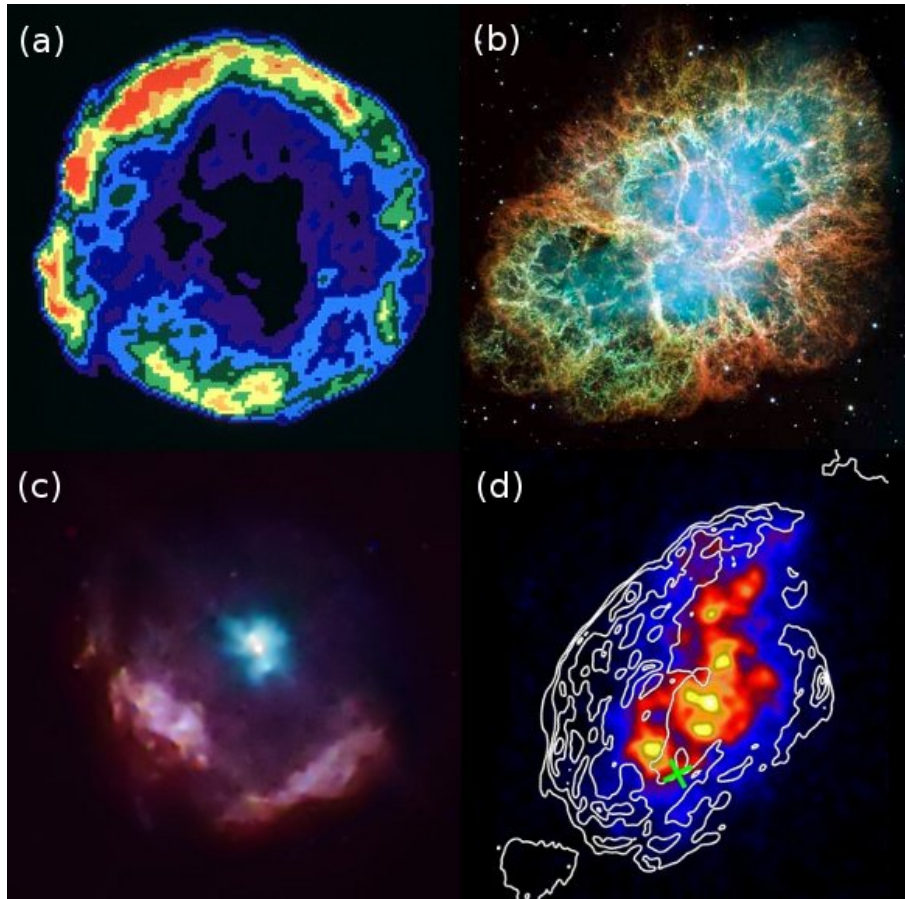


Figura 1.1: Ejemplos de la clasificación morfológica de remanentes de supernova. (a) el remanente tipo cáscara Tycho en radio a 1.4 GHz, con datos del VLA (Reynoso et al. 1997). (b) imagen óptica compuesta ([S II], [O I] y [O III]) de la Nebulosa del Cangrejo, observada con la cámara WFPC2 del Telescopio Espacial Hubble (Loll et al. 2006). (c) el remanente compuesto de tipo pleriónico Kes 75 en rayos X, observado por *Chandra* (Kumar & Safi-Harb 2008); en esta imagen obtenida a partir de las bandas 0.5-1.15 keV (rojo), 1.15-2.3 keV (verde) y 2.3-10 keV (azul) se aprecia la *pulsar wind nebula* central y parte de una cáscara extendida. (d) la emisión centralizada en rayos X (mapa de colores en la banda 0.2-2.4 keV de *ROSAT*) y la estructura de cáscara en radio (contornos a 1.4 GHz del VLA) del remanente W44 lo colocan en la categoría de *thermal composite* (Yoshiike et al. 2013).

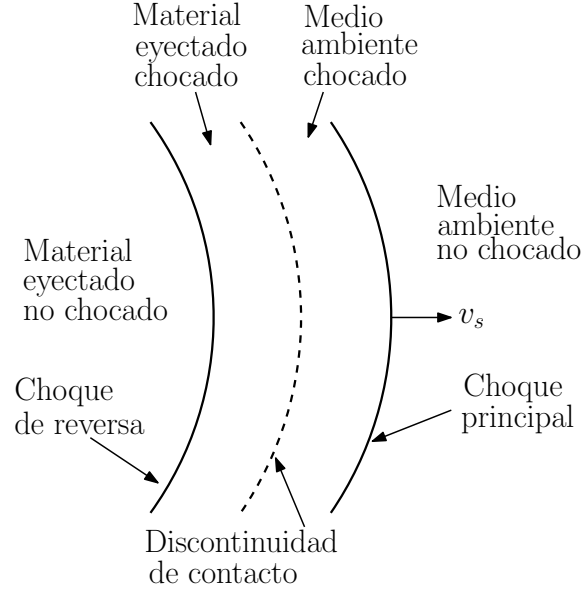


Figura 1.2: Estructura de doble choque típica de un RSN. El choque principal comprime el medio ambiente conforme el RSN se expande. Al interior, se forma un choque de reversa en el cual el material eyectado es comprimido y frenado. Entre los dos choques, una discontinuidad de contacto separa el medio ambiente chocado del material eyectado chocado.

chocado del material eyectado chocado. En la Figura 1.2 se muestra un diagrama de esta estructura de doble choque característica de los RSNs similar a la obtenida en simulaciones numéricas.

Durante esta fase inicial la masa del material eyectada, la cual es normalmente de algunas masas solares, es mayor que la masa del material barrido, por lo cual la evolución está dominada por la cinemática del material eyectado. Debido al enorme momento lineal contenido en el material eyectado, la onda de choque principal no es frenada inicialmente de manera apreciable por su interacción con el medio por lo que la evolución inicial de su radio depende de los detalles de la eyección del material por la supernova. Por ejemplo, en el caso más simple en el cual se asume que el material eyectado tiene un perfil de densidad constante, el radio del choque es simplemente proporcional al tiempo (Truelove & McKee 1999).

Una vez que la masa que ha barrido el choque principal es mayor que la que fue eyectada, el remanente entra en la fase de *Sedov-Taylor*, y la dinámica se aproxima a la solución analítica de Sedov para una explosión esférica. La masa de gas del medio ambiente que ha sido barrido es ahora dinámicamente importante y el choque desacelera

siguiendo la clásica ley $R_s \propto t^{2/5}$ (en el caso de un medio ambiente uniforme). Esta solución es autosimilar, pues la estructura hidrodinámica del remanente en un momento dado se relaciona con la estructura en cualquier otro momento por un simple escalamiento, y puede escribirse de forma única en términos de variables autosimilares.

En las dos primeras fases descritas anteriormente, las pérdidas radiativas del gas chocado son despreciables comparadas con su contenido de energía cinética y térmica. Conforme el choque desacelera, la temperatura del gas chocado desciende hasta el punto en que las pérdidas radiativas se vuelven importantes y la fase Sedov-Taylor llega a su fin. La evolución subsecuente continúa en lo que se conoce como *fase radiativa* (Cioffi, McKee, & Bertschinger 1988). El material del medio ambiente chocado es el primero en enfriarse apreciablemente, formando una capa densa y delgada que encapsula una burbuja de gas todavía caliente. Como la presión de este gas caliente continúa siendo significativamente más alta que la del medio ambiente, se dice que la expansión del remanente se asemeja a una barredora que está impulsada por presión (*pressure-driven snowplow*). Una vez que el interior se enfría también, la cáscara densa continúa expandiéndose ya solamente por su propio momento (*momentum-driven snowplow*).

Finalmente, después de aproximadamente $10^5 \sim 10^6$ años, la velocidad del choque principal se vuelve subsónica y termina por ser comparable con las velocidades típicas del medio ambiente. El remanente se mezcla entonces con el gas del medio interestelar. En la Figura 1.3 se muestran esquemáticamente las distintas de fases de evolución de un RSN. La pendiente m de las rectas en este diagrama logarítmico indica la ley de potencia $R_s \propto t^m$ que describe cada fase.

Aunque esto presenta un modelo bastante conciso de la evolución de RSN, supone que la explosión y el remanente son esféricos. Sin embargo, en la práctica muchos RSN no son esféricos, sino que presentan importantes asimetrías. Esto ha planteado un interesante problema astrofísico. Se han propuesto varios efectos físicos que pueden causar que un remanente no sea esférico: (1) una explosión inicial asimétrica causada por la rotación de la estrella progenitora (Bisnovatyi 1982, Bodenheimer & Woosley 1983) o por la presencia de una compañera (Vigh et al. 2011); (2) inhomogeneidades pequeñas del medio interestelar (Cowie, McKee & Ostriker, 1981); (3) la interacción directa de dos remanentes (Ikeuchi 1978; Jones et al. 1979; Toledo-Roy et al. 2009¹); (4) interacción del

¹Este trabajo se incluye al final de la tesis como Apéndice A.

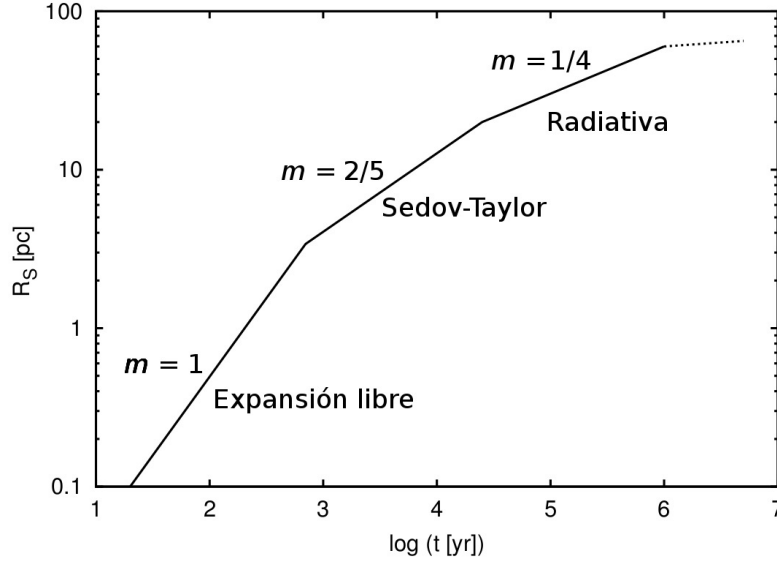


Figura 1.3: Las fases evolutivas de un RSN típico. Cada fase puede ser descrita (aproximadamente) por una ley de potencia, $R_s \propto t^m$.

remanente con nubes moleculares, con el medio internube, o con un gradiente de densidad en el plano galáctico (e.g., Bodenheimer 1984, Arthur & Falle 1991, 1993, Velázquez et al. 2001, Schneider et al. 2006).

Otro aspecto relevante en el estudio de remanentes de supernova es identificar el tipo de la explosión de supernova que dio origen al remanente. Históricamente se distinguen dos categorías determinadas por las características espectroscópicas observadas en la explosión: en las de Tipo II la curva de luz muestra líneas de absorción de Hidrógeno, mientras que en las de Tipo I estas líneas están ausentes. Sin embargo, para el estudio de la dinámica de remanentes se vuelve más relevante clasificarlas según el mecanismo que conduce a la explosión, pues de ahí se desprenden las propiedades del flujo que da origen al remanente. En este sentido, podemos distinguir entre (1) supernovas que son el producto del colapso del núcleo de Fe de una estrella masiva (lo cual corresponde en la clasificación espectroscópica a las explosiones de Tipo II y Tipo Ib/Ic) y (2) aquellas que se deben a la detonación o deflagración termonuclear de una enana blanca de Carbono-Oxígeno (correspondientes al Tipo Ia); ver e.g. Vink (2012).

Como veremos más adelante, para el estudio numérico de la evolución del remanente es relevante establecer, sobre todo, la energía total depositada por la explosión en el material eyectado, así como la masa de este material. En ambos tipos de explosiones la energía

inyectada al material es típicamente de $\sim 10^{51}$ erg (Burrows 2013). Esto puede explicarse considerando que la energía que se libera en la explosión proviene fundamentalmente del colapso gravitacional ya sea de la enana blanca (SN Tipo Ia) o del núcleo de la estrella masiva (SN Tipo Ib/Ic/II), lo cual ocurre cerca del límite de Chandrasekhar en ambos casos. Por tanto, la energía disponible para la explosión es aproximadamente la misma. Las masas eyectadas, sin embargo, son bastante diferentes. En las explosiones de Tipo Ia, la masa eyectada por la explosión nunca es mucho mayor que $\sim 1.5 M_{\odot}$ (Scalzo et al. 2014), pues la masa de la enana blanca está sujeta al límite de Chandrasekhar. En cambio, las masas eyectadas por explosiones colapso de núcleo tienen un rango bastante más grande de variación, pues en estos casos son las capas externas al núcleo de la estrella las que constituyen principalmente el material eyectado. Puesto que la masa final de las estrellas masivas puede variar desde ~ 10 hasta $\sim 40 M_{\odot}$, la masa eyectada por la explosión puede variar entre 1 y $10 M_{\odot}$ (ver, e.g., Woosley & Weaver 1995).

El objetivo de la presente tesis doctoral fue desarrollar un marco para la producción de modelos numéricos integrales de remanentes de supernova que presentan asimetrías producidas por la interacción de éstos con el medio interestelar, y aplicar este marco al estudio de casos específicos. Esto se ha logrado mediante el desarrollo de dos aspectos complementarios:

1. Un modelo analítico de la evolución de remanentes de supernova en general, construido sobre la solución de Sedov y la solución radiativa para RSNs, que permite identificar los parámetros relevantes a la dinámica y evolución del remanente y que sirva como base para garantizar la autoconsistencia de los modelos numéricos. Se ha encontrado un muy buen acuerdo entre este modelo analítico y las simulaciones numéricas. Este objetivo, así como una primera aplicación, conforman el tema del presente capítulo de la tesis.
2. Las herramientas computacionales para realizar simulaciones numéricas hidrodinámicas en 3D que permitan estudiar el detalle de la evolución de los remanentes y simular procesos tridimensionales que producen asimetrías. Para este fin, se ha desarrollado un nuevo código 3D hidrodinámico de malla adaptiva (*adaptive mesh refinements* o AMR) y paralelizado (a través de la librería MPI). Este código, bautizado WALICXE3D, resuelve las ecuaciones de la hidrodinámica en tres dimensiones e in-

cluye un modelo de enfriamiento radiativo para el gas, así como la posibilidad de simular la advección de un campo magnético cuando éste no dinámicamente importante. Esto permite elaborar modelos sin la restricción de la simetría axial o cuyos detalles requieren forzosamente un tratamiento tridimensional. Además, gracias a la malla adaptiva y la paralelización del código, se vuelve posible realizar simulaciones con alta resolución espacial y temporal, aprovechando los amplios recursos computacionales en términos de memoria y capacidad de procesamiento de un cluster. Los detalles de este nuevo código son el tema del segundo capítulo de la tesis.

1.2. Modelo Analítico de Evolución

Desarrollar un modelo analítico para la evolución de los RSNs permite, por un lado, validar los resultados obtenidos en las simulaciones numéricas, y por otro lado, restringir los rangos de valores y número de parámetros posibles necesarios para construir modelos numéricos de objetos específicos. Comenzaremos entonces por describir un modelo analítico simple para la posición del choque principal, R_s , y mostraremos cómo se puede usar para restringir modelos numéricos de RSNs a partir de cantidades observables. El desarrollo de este modelo formó parte del trabajo de maestría y sirvió como base estructural para el proyecto de doctorado; se reproduce parcialmente aquí para que el presente texto sea autocontenido.

La solución más simple para la expansión de la onda de choque producida por una explosión en un medio uniforme es la solución autosimilar encontrada por Sedov (1946) y Taylor (1950), desarrollada inicialmente para describir explosiones atmosféricas. La solución parte de las siguientes suposiciones:

1. Las pérdidas de energía que ocurren en el gas chocado detrás del choque principal son despreciables comparadas con la energía inicial de la explosión (es decir, el choque se supone adiabático);
2. La masa barrida por el choque es mucho mayor que la masa total del material eyectado;
3. La presión dinámica $\rho_0 v^2$ del material que es chocado es mucho mayor que su presión térmica.

La evolución del remanente empieza cuando la energía total de la explosión E_0 es inyectada instantáneamente en una pequeña región de un medio ambiente con densidad inicial uniforme ρ_0 . Puesto que la región de inyección se supone de tamaño despreciable con respecto al tamaño que alcanzará el remanente, la onda de choque producida tendrá simetría esférica, y entonces los únicos parámetros que determinarán la evolución subsecuente son precisamente la energía inicial de la explosión E_0 y la densidad del medio ambiente ρ_0 .

Podemos entonces suponer que el radio del choque principal, R_s , dependerá únicamente de estos dos parámetros y del tiempo:

$$R_s \propto E_0^a \rho_0^b t^c, \quad (1.1)$$

donde a , b y c son exponentes desconocidos a determinar. Puesto que las unidades de estas cantidades son $[R_s] = L$, $[E_0] = ML^2/T^2$ y $[\rho_0] = M/L^3$, donde L indica longitud, M masa y T tiempo, tenemos entonces que:

$$L = M^{a+b} L^{2a-3b} T^{c-2a}. \quad (1.2)$$

Para que esta ecuación sea dimensionalmente consistente, es necesario entonces que $a+b=0$, $2a-3b=1$ y $c-2a=0$. Resolviendo este sistema de ecuaciones encontramos que $a=1/5$, $b=-1/5$ y $c=2/5$. El radio del choque está entonces dado por

$$R_s = \xi_0 \left(\frac{E_0}{\rho_0} \right)^{1/5} t^{2/5}, \quad (1.3)$$

donde ξ_0 es de una constante de proporcionalidad de orden de la unidad y se obtiene aplicando la condición de que la energía mecánica total del remanente contenida en el volumen delimitado por R_s sea constante en el tiempo. Para un gas ideal monoatómico ($\gamma = 5/3$), mediante integración numérica se obtiene un valor de $\xi_0 \approx 1.15337$. De la relación (1.3) se puede obtener la velocidad del choque:

$$v_s(t) = \frac{2}{5} \xi_0 \left(\frac{E_0}{\rho_0} \right)^{1/5} t^{-3/5}. \quad (1.4)$$

Aunque en las simulaciones numéricas el remanente es inicializado dentro de una región de tamaño finito con un radio de algunas décimas de parsec, el modelo analítico supone que la explosión comenzó desde un volumen comparativamente despreciable y que la evolución del remanente entra directamente a la fase descrita por la solución de Sedov. Por lo tanto, este tratamiento implica despreciar la fase inicial de expansión libre del remanente, cosa que no es necesaria, como se verá más adelante, para obtener un buen acuerdo con las simulaciones numéricas. Esto quiere decir que el modelo servirá para estudiar principalmente remanentes de algunos miles de años o más de edad. El estudio de remanentes muy jóvenes, cuyo régimen pueda ser anterior a la fase Sedov, se puede hacer complementado este modelo con una fase de expansión lineal (e.g., Truelove & McKee, 1999).

Puesto que la fase Sedov-Taylor depende de la adiabaticidad del choque, es conveniente encontrar una expresión para la temperatura del gas detrás de éste. Para hacer esto empleamos las relaciones de Rankine-Hugoniot que describen la conservación de masa, momento y energía a través de un choque plano adiabático:

$$\frac{\rho_s}{\rho_0} = \frac{(\gamma + 1)\mathcal{M}^2}{(\gamma - 1)\mathcal{M}^2 + 2}, \quad (1.5)$$

$$\frac{u_s}{u_0} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} + \frac{2}{(\gamma + 1)\mathcal{M}^2}, \quad (1.6)$$

$$\frac{P_s}{P_0} = \frac{2\gamma}{\gamma + 1}\mathcal{M}^2 - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}, \quad (1.7)$$

donde u , ρ y P son la velocidad (en el marco de referencia del choque), densidad y presión del fluido, respectivamente, el subíndice 0 indica a las cantidades correspondientes al medio ambiente no perturbado y el subíndice s a las del material chocado, γ es la razón de capacidades caloríficas del gas, y $\mathcal{M}^2 \equiv \rho_0 u_0^2 / \gamma P_0$ es el número de Mach sónico relativo al medio ambiente. En el caso de un choque fuerte, es decir, cuando $\mathcal{M} \gg 1$ (lo cual es cierto para los choques de RSNs), estas relaciones se reducen a $\rho_s / \rho_0 = u_0 / u_s = (\gamma + 1) / (\gamma - 1)$ y $P_s = 2\rho_0 u_0^2 / (\gamma + 1)$. Podemos entonces emplear la ecuación de estado $P = \rho k_B T / \mu m_H$ para obtener la temperatura del gas chocado:

$$T_s = \frac{2(\gamma - 1)\mu_s m_H}{(\gamma + 1)^2 k_B} v_s^2, \quad (1.8)$$

donde aquí v_s indica la velocidad del choque (en el marco de referencia del medio ambiente), μ_s es la masa promedio por partícula (dada en amus) del gas chocado (el cual se encuentra ionizado tras el paso de la onda de choque, resultando en, e.g., $\mu_s = 0.5$ para Hidrógeno puro o $\mu_s \approx 0.61$ para una mezcla de 90 % Hidrógeno y 10 % Helio), m_H es la unidad de masa atómica y k_B la constante de Boltzmann. Combinando esta expresión con la velocidad de expansión del choque en la fase Sedov, ec. (1.4), podemos relacionar la temperatura post-choque y el tiempo:

$$T = \frac{8(\gamma - 1)\xi_0^2 \mu_s m_H}{25(\gamma + 1)^2 k_B} \left(\frac{E_0}{\rho_0}\right)^{2/5} t^{-6/5}. \quad (1.9)$$

Si se usa la constante de proporcionalidad ξ_0 calculada anteriormente, y se toman $\gamma = 5/3$ (gas monoatómico) y $\mu_0 = 1.3$, $\mu_s \approx 0.61$, se puede entonces escribir expresiones concisas para el radio, velocidad y temperatura detrás del choque en función del tiempo t transcurrido desde la explosión:

$$R_s(t) = 5.0674 \times \left(\frac{E_{51}}{n_0}\right)^{1/5} \left(\frac{t}{10^3 \text{yr}}\right)^{2/5} [\text{pc}], \quad (1.10)$$

$$v_s(t) = 1982.0 \times \left(\frac{E_{51}}{n_0}\right)^{1/5} \left(\frac{t}{10^3 \text{yr}}\right)^{-3/5} [\text{km s}^{-1}], \quad (1.11)$$

$$T(t) = 55.262 \times \left(\frac{E_{51}}{n_0}\right)^{2/5} \left(\frac{t}{10^3 \text{yr}}\right)^{-6/5} [10^6 \text{K}], \quad (1.12)$$

donde E_{51} es la energía total inyectada por la supernova en unidades de 10^{51} erg y n_0 la densidad numérica del medio ambiente pre-choque dada en unidades de cm^{-3} .

Consideramos ahora que la fase Sedov-Taylor termina cuando la temperatura desciende por debajo de un valor umbral T_{rad} . En ese momento las pérdidas radiativas del gas detrás del choque se vuelven importantes y el RSN entra a la fase radiativa. Podemos despejar el tiempo t_{rad} al cual ocurre esto de la ec. (1.9):

$$t_{\text{rad}} = \left[\frac{8(\gamma - 1)\xi_0^2 \mu_s m_H^{3/5}}{25(\gamma + 1)^2 \mu_0^{2/5} k_B} \right]^{5/6} \left(\frac{E_0}{n_0}\right)^{1/3} T_{\text{rad}}^{-5/6}. \quad (1.13)$$

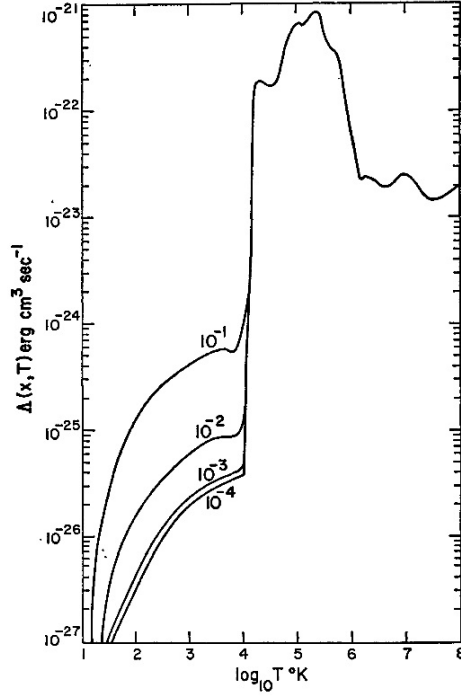


Figura 1.4: La función de enfriamiento representativa para el gas interestelar bajo la suposición de equilibrio coronal (Dalgarno & McCray 1972), mostrada aquí para varios valores de la fracción de ionización.

El radio R_{rad} y velocidad v_{rad} del choque en este momento son:

$$R_{\text{rad}} = \left[\frac{8(\gamma - 1)}{25(\gamma + 1)^2} \frac{\mu_s \xi_0^5}{\mu_0 k_B} \right]^{1/3} \left(\frac{E_0}{n_0} \right)^{1/3} T_{\text{rad}}^{-1/3}, \quad (1.14)$$

$$v_{\text{rad}} = \left[\frac{(\gamma + 1)^2}{(\gamma - 1)} \frac{k_B}{2\mu_s m_H} \right]^{1/2} T_{\text{rad}}^{1/2}. \quad (1.15)$$

Esta transición ocurre aproximadamente cuando $T_{\text{rad}} \sim 10^6 \text{ K}$, temperatura a la cual iones como C, N, Ne y O pueden adquirir electrones ligados y proporcionan una fuente de enfriamiento eficiente (Rohlf & Wilson 2000; Schure 2009). En la Figura 1.4 se muestra la función de enfriamiento representativa para el gas en equilibrio coronal. Se ve que el enfriamiento es eficiente en el rango $10^4 - 10^6 \text{ K}$. Las distintas curvas de la figura corresponden a distintos valores de la fracción de ionización del gas (por arriba de $\sim 10^4 \text{ K}$, todo el gas está ionizado). Este tiempo de transición coincide con el tiempo en que se forma una cáscara delgada en las simulaciones numéricas. Con los valores usados anteriormente para ξ_0 , γ , μ_0 y μ_s , se encuentran las expresiones compactas siguientes:

$$t_{\text{rad}} = 28.315 \times \left(\frac{E_{51}^*}{n_0^*} \right)^{1/3} (T_6)^{-5/6} \text{ [kyr]}, \quad (1.16)$$

$$R_{\text{rad}} = 19.309 \times \left(\frac{E_{51}^*}{n_0^*} \right)^{1/3} (T_6)^{-1/3} \text{ [pc]}, \quad (1.17)$$

$$v_{\text{rad}} = 266.48 \times (T_6)^{1/2} \text{ [km s}^{-1}\text{]}, \quad (1.18)$$

donde T_6 es la temperatura umbral de transición dada en unidades de 10^6 K.

La estimación sencilla que hemos hecho aquí del tiempo de transición coincide razonablemente con otras estimaciones que se encuentran en la literatura. Por ejemplo, suponiendo que la transición ocurre cuando la edad del remanente es la escala de tiempo de enfriamiento y escogiendo una forma funcional aproximada de la función de enfriamiento, Blondin et al. (1998) encuentran un tiempo de transición de $t_{\text{rad}} \approx 2.9 \times 10^4 E_{51}^{4/17} n_0^{-9/17}$ años.

En realidad este cambio no ocurre instantáneamente, de manera que existen periodos transitorios en los que el remanente pasa gradualmente entre un régimen evolutivo y otro. Durante estos periodos pueden presentarse fenómenos físicos adicionales a los que hemos descrito aquí. Se ha encontrado que la transición a la fase de pérdidas radiativas está acompañada de fluctuaciones causadas por el enfriamiento rápido (*catastrófico*) del gas ambiente chocado en una capa delgada que se extiende hasta cierta distancia detrás del choque principal ($r/r_s \sim 0.85$, donde r_s es el radio del choque principal; Falle 1981). Este enfriamiento causa que se formen choques secundarios adicionales, lo cual puede manifestarse como oscilaciones en la velocidad del choque principal durante el periodo de transición. Sin embargo, se puede argumentar que el ancho espacial de la zona donde el efecto es importante es pequeño en comparación con el tamaño que el remanente ha alcanzado cuando las pérdidas radiativas son importantes, de manera que la evolución dinámica global del remanente debería volverse insensible a este efecto poco tiempo después de la transición (Blondin et al. 1998).

En la fase radiativa la evolución del remanente deja de ser autosimilar, pero aún puede ser descrita por una ley de potencia, $R_s \propto t^m$. Sin embargo, no existe un consenso aún en la literatura sobre el valor del exponente m . El modelo más simple, en el cual se considera que el remanente forma una cáscara delgada y que la evolución subsecuente está determinada

por la conservación de momento lineal, produce el valor $m = 1/4$ (Truelove & McKee 1999). Sin embargo, Chevalier (1974) y McKee & Ostriker (1977) mostraron que el gas al interior del remanente puede mantener temperaturas elevadas por tiempos grandes y que la correspondiente presión térmica del interior puede tener un efecto dinámico importante sobre la expansión. Incluyendo este efecto, se obtiene que $m = 2/7 \approx 0.286$. Complicando la cuestión, los resultados de simulaciones numéricas parecen indicar valores más altos, $m \sim 0.33$ (Bandiera & Petruk 2004). Esta discrepancia podría ser causada por una presión al interior del remanente que no coincide exactamente con la calculada por la solución de Sedov (Cioffi et al. 1988) o por el efecto que tiene el choque de reversa al recorrer el interior del remanente (Blondin et al. 1998).

En el caso más simple, el momento lineal contenido en el volumen barrido por el choque es constante, y puede igualarse a su valor al momento de la transición: $(4\pi/3)R_s^3\rho_0v_s = \text{constante} = (4\pi/3)R_{\text{rad}}^3\rho_0v_{\text{rad}}$. Escribiendo $v_s = dR_s/dt$ e integrando desde la transición hasta un tiempo arbitrario, se obtiene:

$$R_s(t \geq t_{\text{rad}}) = R_{\text{rad}} \left[1 + 4 \frac{v_{\text{rad}}}{R_{\text{rad}}} (t - t_{\text{rad}}) \right]^{1/4}, \quad (1.19)$$

lo cual tiende asintóticamente a la solución con $m = 1/4$.

También se puede hacer el cálculo en general para cualquier valor de m si se supone que $R_s \propto t^m$ y se pide que $R_s(t_{\text{rad}}) = R_{\text{rad}}$; en ese caso se puede escribir $R_s = R_{\text{rad}}(t/t_{\text{rad}})^m$. Comparando las ecuaciones (1.3) y (1.4) se puede ver que $R_{\text{rad}} = (5/2)v_{\text{rad}}t_{\text{rad}}$, y entonces el radio del remanente está dada por

$$R_s(t \geq t_{\text{rad}}) = R_{\text{rad}} \left[1 + \frac{5}{2} \frac{v_{\text{rad}}}{t_{\text{rad}}} (t - t_{\text{rad}}) \right]^m, \quad (1.20)$$

y la velocidad del choque principal por

$$v_s(t \geq t_{\text{rad}}) = \frac{5m}{2} v_{\text{rad}} \left[1 + \frac{5}{2} \frac{v_{\text{rad}}}{t_{\text{rad}}} (t - t_{\text{rad}}) \right]^{m-1}. \quad (1.21)$$

Algo interesante de esta solución analítica es que si comparamos las expresiones (1.20)

y (1.21), se puede verificar que

$$R_s(t) [v_s(t)]^{m/(1-m)} = \text{constante.} \quad (1.22)$$

Fijando la constante con los valores al tiempo de la transición, R_{rad} y v_{rad} , y empleando las ecs. (1.14) y (1.15), se puede obtener una relación entre la razón de la energía de la explosión E_0 y la densidad del medio pre-choque n_0 , y el radio y velocidad del remanente en cualquier momento de la fase radiativa:

$$\frac{E_0}{n_0} = \frac{25\mu_0(2m_H)^{3b/2}k_B^{1-3b/2}(\gamma+1)^{2-3b}}{8\mu_s^{1-3b/2}\xi_0^5(\gamma-1)^{1-3b/2}} T_{\text{rad}}^{1-3b/2} \times R_s^3 v_s^{3b}, \quad (1.23)$$

donde se ha definido $b \equiv m/(1-m)$. Para los valores $m = 1/4$ y $\gamma = 5/3$, esto resulta en una expresión simple:

$$\frac{E_0}{n_0} = \frac{25\mu_0}{\xi_0^5} \left(\frac{k_B m_H}{3\mu_s} \right)^{1/2} T_{\text{rad}}^{1/2} \times R_s^3 v_s, \quad (1.24)$$

o bien, empleando los valores típicos mencionados anteriormente,

$$\frac{E_{51}^*}{n_0^*} = 5.22 \times 10^{-7} \left(\frac{R_s}{\text{pc}} \right)^3 \left(\frac{v_s}{\text{km s}^{-1}} \right). \quad (1.25)$$

Esto es particularmente interesante pues indica que incluso un remanente evolucionado que ya no se encuentra en la fase Sedov-Taylor guarda aún “memoria” de la energía inicial de la explosión. Como el tamaño R_s , la velocidad de expansión v_s y la densidad del medio ambiente n_0 pueden usualmente determinarse observacionalmente, esto permite hacer una estimación de la energía inicial que fue depositada en el material eyectado por la supernova.

Para terminar, podemos resumir el modelo analítico de evolución del radio del remanente en las fases de Sedov-Taylor y radiativa de la siguiente forma:

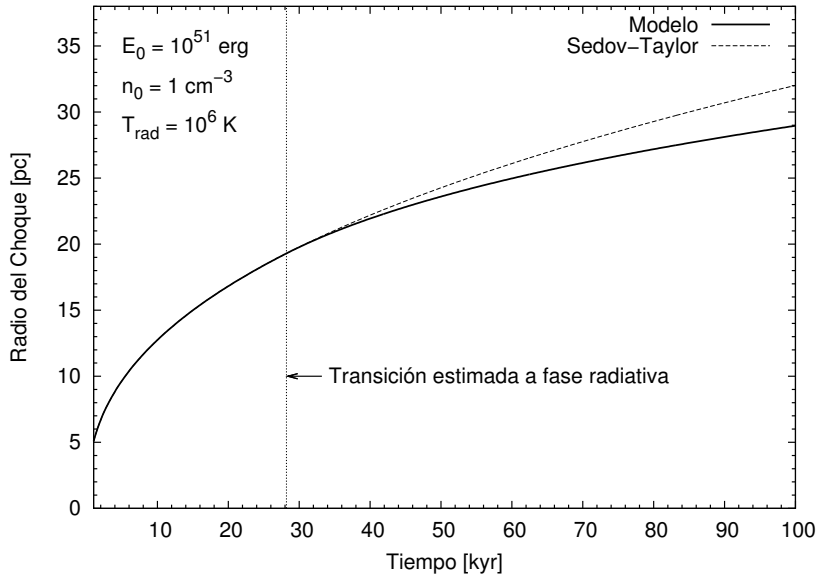


Figura 1.5: La posición del choque como función del tiempo según el modelo analítico de evolución para remanentes de edad intermedia y viejos. El tiempo de la transición a la fase radiativa es controlado por el parámetro T_{rad} .

$$R_s(t) = \begin{cases} \xi_0 \left(\frac{E_0}{\rho_0} \right)^{1/5} t^{2/5} & \text{si } t \leq t_{\text{rad}} \\ R_{\text{rad}} \left[1 + \frac{5}{2} \frac{v_{\text{rad}}}{R_{\text{rad}}} (t - t_{\text{rad}}) \right]^m & \text{si } t \geq t_{\text{rad}} \end{cases}$$

donde t_{rad} , R_{rad} y v_{rad} están dados por las expresiones (1.13), (1.14) y (1.15), respectivamente. En la Figura 1.5, se muestra este modelo analítico graficado para los valores típicos $E_0 = 10^{51} \text{ erg}$, $n_0 = 1 \text{ cm}^{-3}$, $\mu_0 = 1.3$, $\mu_s = 0.62$ y $T_{\text{rad}} = 10^6 \text{ K}$.

Un fenómeno que puede ser importante en remanentes en fase radiativa es que la radiación emitida por el gas chocado puede ser absorbida por el gas del medio ambiente delante del choque, calentándolo e incluso ionizándolo, alterando así las propiedades del medio pre-choque que hemos supuesto en estos modelos (produciendo un *precursor radiativo*). Por ejemplo, se ha encontrado que la radiación UV producida en choques radiativos que se mueven con velocidades del orden de 100 km s^{-1} es capaz de ionizar completamente el gas ambiente delante del choque (Shull & McKee 1979). Esto puede conducir a la formación de una región HII alrededor del remanente de supernova (Arthur 2002) y puede contribuir de manera importante al estado de ionización en el halo Galáctico (Slavin et al. 2000).

Cabe mencionar finalmente que estas soluciones pueden también extenderse a un medio

ambiente cuya densidad no es uniforme, y también pueden modificarse para incluir el efecto de un perfil de densidad más realista para el material eyectado, lo cual es relevante en la fase inicial de expansión libre.

La solución de Sedov para una explosión en un medio ambiente cuya densidad sigue un perfil del tipo $\rho(r) \propto r^{-s}$ resulta en $R_s \propto R^\beta$, donde $\beta = 2/(5-s)$ se denomina *parámetro de expansión* (Chevalier 1982). El caso $s = 2$ (para el cual $\beta = 2/3$) es particularmente relevante pues corresponde a la estructura de densidad producida por un viento estelar de velocidad terminal y tasa de pérdida de masa constantes.

Si se quiere estudiar la dinámica de remanentes muy jóvenes se vuelve también necesario considerar el perfil de densidad del material eyectado por la explosión, el cual puede ser aproximado con una ley de potencia del tipo $\rho_{\text{ej}} \propto v_{\text{ej}}^{-n}$. En ese caso, Chevalier (1982) encuentra que la expansión está dada por $R_s \propto t^{(n-3)/(n-s)}$. Valores típicos de n son $n = 10 - 12$ para explosiones de tipo *core-collapse* y $n = 7$ para tipo Ia (Reynolds 2008).

Este esquema puede cambiar bajo ciertas circunstancias. Por un lado, si el medio ambiente es muy denso (e.g., $n_0 \gtrsim 10^3 \text{ cm}^{-3}$ para $E_0 \sim 10^{51}$ erg y una masa eyectada $\sim 1 M_\odot$; Falle 1981), es posible que el remanente nunca entre a la fase de Sedov-Taylor y pase directamente a la fase radiativa y el modelo tendría que ajustarse apropiadamente. Sin embargo, esto no es común, pues las densidades típicas del medio interestelar en el que explotan las supernovas son usualmente más bajas (e.g., McKee & Ostriker 1977). Por otro lado, si el remanente se expande en un medio ambiente que no es homogéneo e isótropo, es posible que distintas partes del remanente evolucionen a distinto paso. Por ejemplo, para el caso de una explosión que ocurre en el borde de una cavidad de baja densidad (Arthur 1991), se encuentra que la mayoría de la energía de la explosión quedará depositada en el material que se propaga hacia adentro de la cavidad, y que el tiempo de transición a la fase radiativa será mucho más corto para el gas que se expande en el medio circundante más denso.

Estos modelos analíticos sirvieron de base para validar los resultados de simulaciones numéricas. Además, el hecho de que se puedan relacionar el radio y velocidad del choque con la energía inicial y la densidad del medio permite emplear el tamaño observado del remanente para restringir la energía a inyectar en la explosión inicial. Como se ve describe en la siguiente sección, el acuerdo entre estas predicciones teóricas y las simulaciones es muy bueno.

1.3. Pruebas y Aplicaciones Numéricas

Para probar este modelo analítico, se empleó el código hidrodinámico MEXCALC desarrollado en Fortran77 originalmente por Fabio de Colle (2005), como parte de su tesis doctoral, y actualizado y adaptado para servir el propósito deseado. El código fue adaptado al estándar más estricto de Fortran90/95, y se le agregaron subrutinas adicionales que permiten reiniciar el código desde cualquier punto en la ejecución del programa.

Este código es de malla fija rectangular e integra las ecuaciones de la dinámica de gases en coordenadas cilíndricas (es decir, el dominio computacional es axisimétrico en torno a uno los ejes). El algoritmo de solución es el HLLE/HLLC propuesto por Toro, Spruce & Speares (1994), el cual mejora el algoritmo HLL propuesto por Harten, Lax & van Leer (1983) al encontrar una solución de dos estados intermedios para el problema de Riemann aproximado. La virtud adicional del método HLLC de E.F. Toro (1999) es que captura adecuadamente discontinuidades de contacto aisladas. Este algoritmo se describe con mayor detalle en el Capítulo 2.

El código resuelve las ecuaciones de Euler compresibles de la dinámica de gases en 2D en coordenadas cilíndricas (axisimétricas), las cuales pueden escribirse como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} + \frac{\partial(\rho u_r)}{\partial r} = -\frac{\rho u_r}{r}, \quad (1.26)$$

$$\frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} + \frac{\partial(p + \rho u_z^2)}{\partial z} + \frac{\partial(\rho u_z u_r)}{\partial r} = -\frac{\rho u_z u_r}{r}, \quad (1.27)$$

$$\frac{\partial(\rho u_r)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_z u_r)}{\partial z} + \frac{\partial(p + \rho u_r^2)}{\partial r} = -\frac{\rho u_r^2}{r}, \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{u_z(E + p)}{\partial z} + \frac{\partial(u_r(E + p))}{\partial r} = -\frac{\rho u_r E}{r} - n^2 \Lambda(T) - \nabla \cdot F_c. \quad (1.29)$$

Aquí ρ es la densidad de masa, u_z y u_r son las componentes de la velocidad en las direcciones z y r , respectivamente, p es la presión térmica, y $E = \rho e + \frac{1}{2}\rho(u_z^2 + u_r^2)$ es la energía total por unidad de volumen, con e la energía interna del gas por unidad de masa. Para cerrar el sistema, se incluye una ecuación de estado de gas ideal, $p = \rho e (\gamma - 1)$.

El lado derecho en las ecs. (1.26)-(1.29) contiene términos fuente geométricos introducidos por la elección de las coordenadas cilíndricas. Además, en la ec. (1.29) se incluyen también términos fuente adicionales para la energía: en este caso, enfriamiento radiativo,

donde $\Lambda(T)$ es la función de enfriamiento, y conducción térmica, donde F_c es el flujo de conducción térmica.

Para el enfriamiento radiativo, la función $\Lambda(T)$ es tomada de la curva de enfriamiento en equilibrio coronal de Dalgarno & McCray (1972), la cual supone que los distintos iones se encuentran en equilibrio de ionización colisional y abundancias cósmicas. La emisión resultante es producto de excitación y ionización colisional, y a altas temperaturas, está dominada por emisión libre-libre (Bremsstrahlung). Numéricamente, el enfriamiento se aplica como una corrección a posteriori en la ecuación de energía (un término fuente) en cada celda del dominio computacional. Para reducir y controlar la posibilidad de que el enfriamiento pueda eliminar más energía interna de la que tiene la celda (debido al comportamiento altamente no-lineal de la función de enfriamiento, y en parte, a posibles errores numéricos), el código calcula en cada celda la escala de tiempo de pérdidas radiativas,

$$\tau_{\text{cool}}(i, j) = \epsilon \times \frac{E(i, j)}{n^2 \Lambda(t)}, \quad (1.30)$$

donde $\epsilon < 1$ se escoge alrededor de 0.4, y se limita el paso temporal global del código a no ser mayor que este valor.

La conducción térmica se modela como conducción electrónica isotrópica clásica (en la ausencia de campo magnético), proporcional al gradiente de temperatura, y está dada por

$$F_c^e = -\kappa \nabla T, \quad (1.31)$$

donde $\kappa = \beta T^{5/2}$ es la conductividad térmica, con $\beta \approx 6 \times 10^{-7} \text{erg s}^{-1} \text{K}^{-1} \text{cm}^{-1}$ para un plasma completamente ionizado (Spitzer 1962). Sin embargo, esta expresión clásica deja de ser válida si el camino libre medio de los electrones λ_e es más grande que la escala de longitud de temperatura, $L_T = T/|\nabla T|$. En ese caso, tomamos el valor de flujo saturado obtenido por Cowie & McKee (1977):

$$F_c^{\text{sat}} = -5\phi c p, \quad (1.32)$$

donde $c = \sqrt{p/\rho}$ es la velocidad del sonido isotérmica, p es la presión del gas y ϕ es un coeficiente adimensional de orden 1. El código integra iterativamente el término fuente correspondiente a la conducción térmica en la ecuación de energía empleando un número fijo de pasos, calculando la divergencia del flujo mediante diferencias finitas. El flujo que se emplea es el menor de F_c^e y F_c^{sat} en cada iteración. De forma similar al enfriamiento radiativo, el código estima una escala de tiempo τ_{cond} para la conducción térmica, y limita el paso de tiempo global a no ser mayor a este valor. La desventaja de esto es que la escala de tiempo de conducción térmica es usualmente menor (a veces dos órdenes de magnitud) que las escalas de tiempo hidrodinámica o radiativa. En algunos casos, se probó integrar cada paso de tiempo sin tomar en cuenta la escala temporal de conducción. Aunque de esta forma no se resuelve correctamente la zona donde la conducción térmica es importante, se encontró que la evolución general del remanente no presenta desviaciones significativas del caso cuando sí se toma en cuenta la escala temporal de conducción.

1.3.1. Inicialización de Remanentes

Para inicializar el remanente de supernova en la simulación numérica, la metodología que se siguió consiste en agregar energía y masa en una región circular del dominio computacional (es decir, una esfera, considerando la simetría axial). Del modelo analítico que hicimos se pueden calcular los valores de todas las variables hidrodinámicas relevantes en términos únicamente de cuatro parámetros principales: la energía inyectada E_{SN} , la masa total inyectada M_{SN} , el radio de la región de inyección R_{SN} y la razón de energía cinética a energía total, ξ :

$$\rho_{\text{SN}} = \frac{3}{4\pi} \frac{M_{\text{SN}}}{R_{\text{SN}}^3}, \quad (1.33)$$

$$E_K = \xi \cdot E_{\text{SN}}, \quad (1.34)$$

$$E_T = (1 - \xi) \cdot E_{\text{SN}}, \quad (1.35)$$

$$v_{\text{SN}}(r) = \sqrt{\frac{10}{3} \frac{E_K}{M_{\text{SN}}}} \cdot \frac{r}{R_{\text{SN}}}, \quad (1.36)$$

$$T_{\text{SN}} = \frac{E_T}{M_{\text{SN}}} \frac{\mu_i}{c_V k_B}, \quad (1.37)$$

$$P_{\text{SN}} = \frac{3}{4\pi} \frac{E_T}{R_{\text{SN}}^3 c_V}, \quad (1.38)$$

donde μ_i es la masa molecular del gas ionizado y $c_V = 1/(\gamma - 1)$. La velocidad del gas impuesta dentro de la zona de inyección se calcula siguiendo un perfil radial lineal, lo cual es consistente con una eyección balística del gas de la supernova, aunque cabe mencionar que este tipo de detalles no afecta la evolución a largo plazo de remanentes que están ya en la fase Sedov-Taylor de evolución o posterior. Nótese que estos perfiles no buscan modelar el material eyectado por un tipo de supernova específico, por lo que son aplicables solamente para estudiar la evolución del remanente una vez que entra a la fase de evolución autosimilar en la que se pierde la memoria de los detalles con los que la explosión fue inicializada. Si se desea estudiar la evolución de remanente jóvenes (de algunos cientos de años de edad), entonces se deberá emplear un modelo para el material eyectado para inicializar correctamente el remanente (como se hizo en el trabajo sobre el SNR de Kepler; ver Capítulo 4).

En cada caso, se escogió un radio inicial R_{SN} pequeño (relativo al tamaño físico de la caja computacional), pero abarcando suficientes celdas del dominio como para producir una región aproximadamente esférica. El valor típico para el radio de la región de inyección fue de 0.5 pc.

1.3.2. Comparación con el Modelo Analítico

En la Figura 1.6 se muestran mapas de densidad (en g cm^{-3}) de una simulación numérica del remanente de una supernova que explotó con 10^{51} erg de energía total en un medio de densidad 1 cm^{-3} , una masa eyectada de $2 M_{\odot}$ y una distribución equitativa de energía ($\xi = 0.5$). Los paneles individuales correspondan a distintas edades de evolución: (a) 10 kyr, (b) 30 kyr, (c) 60 kyr y (d) 80 kyr. La caja computacional tiene 1024×1024 celdas de lado con un tamaño físico de $30 \text{ pc} \times 30 \text{ pc}$, lo que corresponde a una resolución de 0.03 pc/celda.

Del análisis del radio del remanente a distintos tiempos, se estima que la transición a la fase radiativa para este remanente ocurrió cuando $T_{\text{rad}} \approx 0.43 \times 10^6 \text{ K}$, lo cual corresponde a $t \approx 57 \text{ kyr}$. Esto se puede apreciar gráficamente en el panel (d) de la Figura 1.6 por la ausencia de un gradiente extendido en la densidad detrás del choque principal: el choque es una cáscara delgada y muy densa.

En la Figura 1.7, se comparan los perfiles radiales de densidad extraídos de la simulación para los tiempos $t = 30 \text{ kyr}$ (panel (b) de la Figura 1.6) y 80 kyr (panel (d) de la

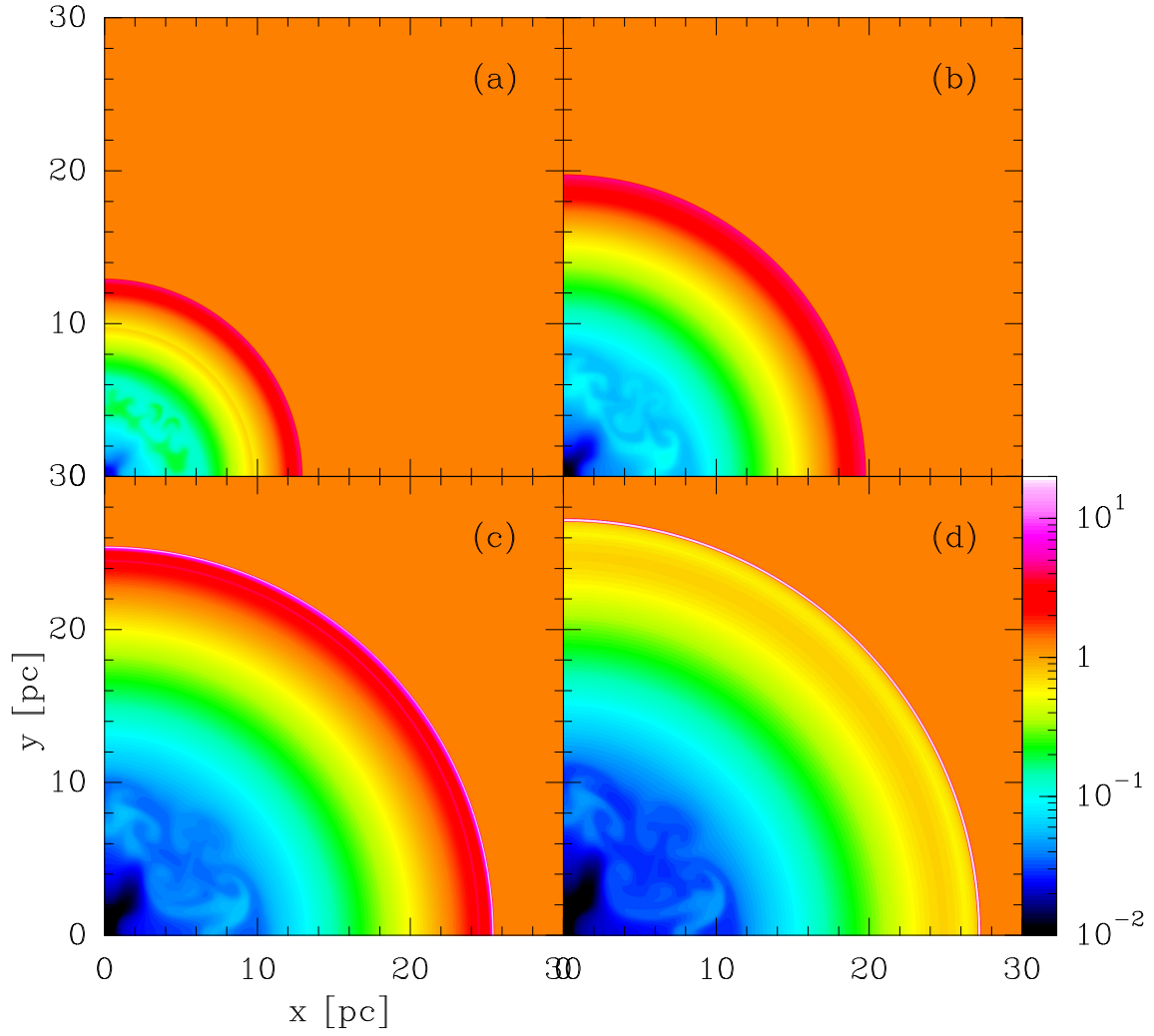


Figura 1.6: Mapas de densidad de una simulación numérica de un remanente de supernova con $E_0 = 10^{51}$ erg y $n_0 = 1 \text{ cm}^{-3}$, para los tiempos (a) $t = 10$ kyr, (b) 30 kyr, (c) 60 kyr y (d) 80 kyr de evolución. La escala está dada en g cm^{-3} .

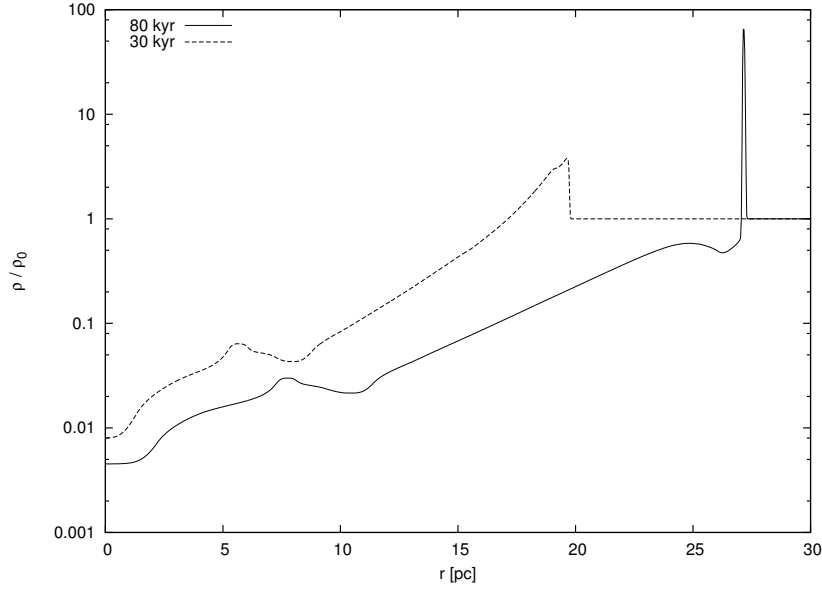


Figura 1.7: Perfiles radiales de densidad correspondientes a los paneles (b) y (d) de la Figura 1.6. El eje horizontal es la distancia radial al centro del remanente, y el eje vertical indica la densidad normalizada al valor del medio ambiente.

Figura 1.6). Se ve claramente en el perfil de densidad que después de la transición a la fase radiativa (línea continua) el choque es una cáscara delgada y muy densa, mientras que durante la fase Sedov (línea punteada) el gradiente de densidad detrás de la región del choque es relativamente suave, y el salto de densidad en el choque principal no rebasa nunca un factor de 4, como se espera de las condiciones de Rankine-Hugoniot para un choque fuerte adiabático. Obsérvese también el choque de reversa, el cual se ha reflejado ya en el centro del remanente y está recorriendo el camino de vuelta hacia el borde.

En la Figura 1.8 se compara la evolución del radio del choque en esta simulación con el modelo analítico descrito anteriormente (usando el valor de $T_{\text{rad}} = 0.43 \times 10^6$ K). Se encuentra una muy buena concordancia.

1.3.3. Pruebas de Convergencia

Para estudiar la convergencia de las simulaciones numéricas se trató de caracterizar el impacto que tiene sobre las simulaciones numéricas el variar tres factores involucrados en la manera en que se inicializa el remanente: i) la masa inyectada, ii) la forma en que se distribuye la energía en cinética y térmica y iii) el radio de la región de inyección. En el modelo que hemos desarrollado, la evolución del remanente *no* es sensible a estos factores,

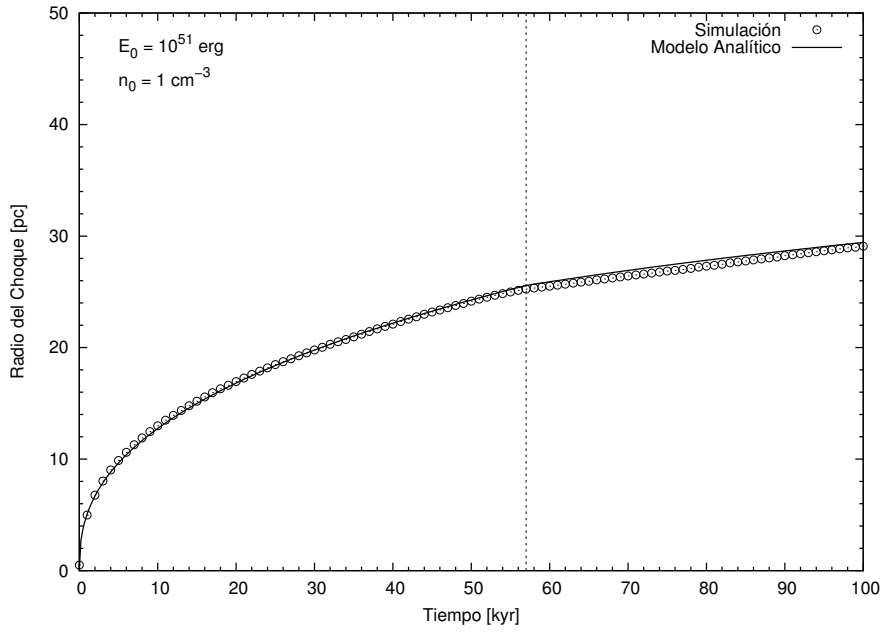


Figura 1.8: Comparación entre la predicción del modelo analítico (curva continua) y la simulación (círculos) del radio del choque principal de un remanente de supernova.

pues la solución autosimilar de Sedov sólo depende de la energía *total* y de la densidad del medio ambiente.

Para este fin, se realizó primero una serie de simulaciones con los parámetros comunes $E_{\text{SN}} = 10^{51}$ erg, $R_{\text{SN}} = 0.5$ pc, $\xi = 0.5$ pero variando la masa inyectada con los valores $M_{\text{SN}} = 1.0 M_{\odot}$, $1.4 M_{\odot}$, $2.0 M_{\odot}$, $3.0 M_{\odot}$, $4.0 M_{\odot}$ y $5.0 M_{\odot}$. En todos los casos la densidad del medio ambiente es de $n_0 = 1.0 \text{ cm}^{-3}$. La evolución del radio del remanente para cada caso se muestra en la Figura 1.9.

La desviación máxima observada en la evolución del radio del choque principal entre estos modelos es de 0.14 pc en 50 kyr de evolución, lo cual constituye menos del 1% de error en el radio final del remanente.

En segundo lugar, se realizó una serie de simulaciones en las cuales se mantuvieron fijos los parámetros $E_{\text{SN}} = 10^{51}$ erg, $R_{\text{SN}} = 0.5$ pc, $M_{\text{SN}} = 2.0 M_{\odot}$, pero se varió la manera en que se distribuye inicialmente la energía mecánica, la cual está caracterizada por la razón de energía cinética a energía total, $\xi \equiv E_K/E_0$, siendo el restante energía térmica (i.e., $E_0 = E_K + E_{th}$). Se asignaron a ξ los valores $\xi = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$ y 0.9 . Se muestra el resultado de esta prueba en la Figura 1.10. En este caso, la desviación máxima producida es de 0.03 pc, que no es significativa pues es del orden de la resolución de la malla.

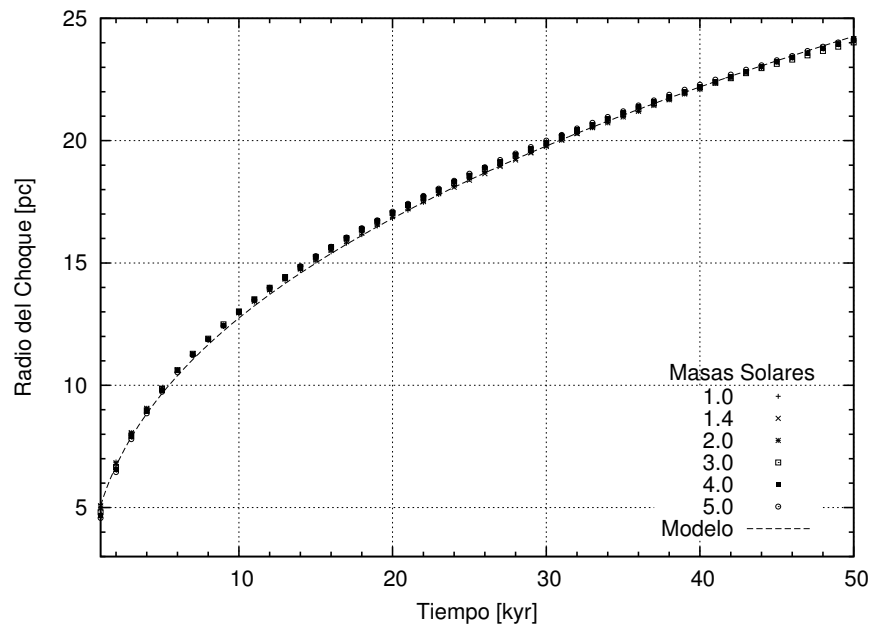


Figura 1.9: Comparación del impacto en la evolución del remanente de cambiar la masa inyectada inicial.

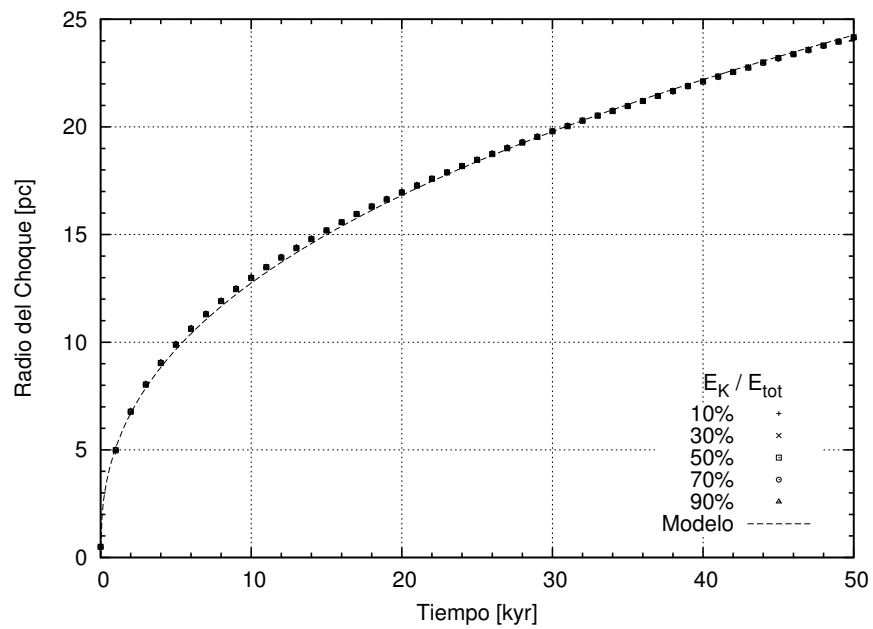


Figura 1.10: Comparación del impacto en la evolución del remanente de variar la distribución de energía

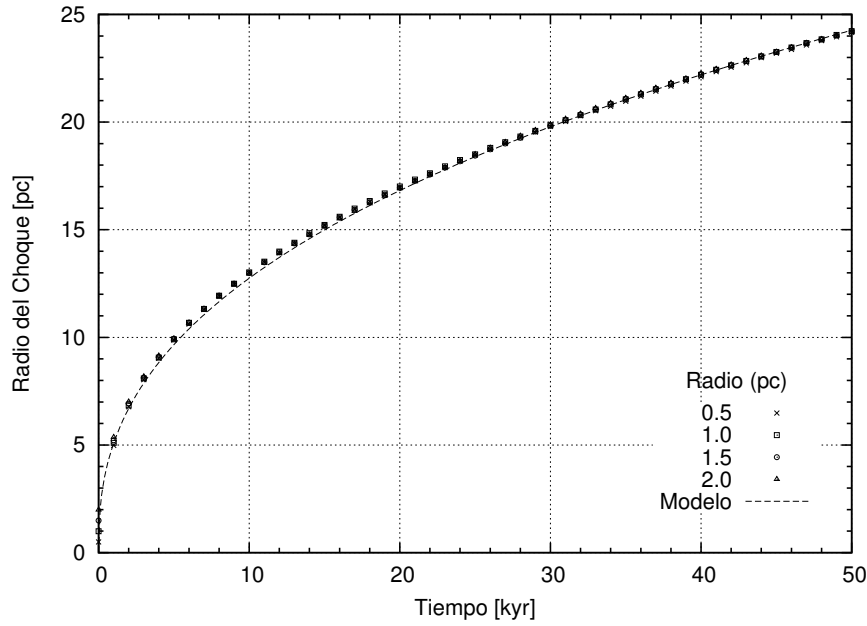


Figura 1.11: Comparación del impacto en la evolución del remanente de cambiar el radio de la región de inyección.

Por último, se realizó otra secuencia de simulaciones en las cuales esta vez el parámetro a variar es el radio inicial del remanente, fijando los demás valores a $E_{\text{SN}} = 10^{51}$ erg, $M_{\text{SN}} = 2.0 M_{\odot}$, $\xi = 0.5$. Al radio inicial se le dieron los valores $R_{\text{SN}} = 0.1$ pc, 0.5 pc, 1.0 pc, 1.5 pc y 2.0 pc. El resultado se puede ver en la Figura 1.11.

La desviación máxima observada en este caso es del orden de 0.5 pc en 50 kyr, que aunque no es del todo despreciable, es suficientemente pequeña para validar el modelo numérico.

1.3.4. Colisión de Dos Remanentes

Además de pruebas con remanentes únicos, se realizaron pruebas con dos remanentes que interactúan. Estas pruebas siguen el trabajo de Ikeuchi (1978), el cual es un estudio genérico de interacciones de dos remanentes. En dicho trabajo, se presentan varios modelos de simulaciones numéricas con dos remanentes en los cuales se varían las distancias y tiempo de explosión del segundo remanente con el fin de producir distintas morfologías.

Ikeuchi (1978) encuentra que el resultado de la interacción entre los remanentes depende principalmente de las fases evolutivas en las cuales se encuentran. Si los dos remanentes se encuentran ya en la fase radiativa, el enfriamiento radiativo Λ en la región de interacción

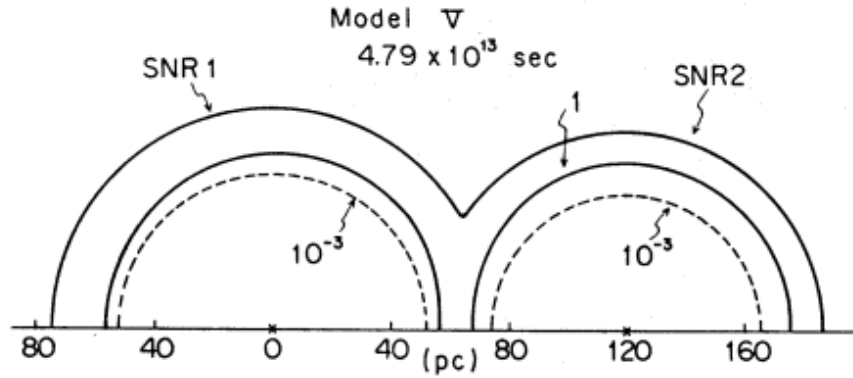


Figura 1.12: Figura 6 de Ikeuchi (1978), mostrando dos remanentes de supernova en el caso *non-merged*, en el cual el segundo remanente explota a una distancia suficiente del primero para que la colisión ocurra cuando ambos están en fase radiativa.

domina sobre el calentamiento producido por la disipación de energía cinética durante el encuentro. Como consecuencia los remanentes no se “fusionan”, manteniendo sus identidades independientes y separados por una región de choque de muy alta densidad (ver Figura 1.12).

En cambio, si la colisión ocurre lo suficientemente temprano en la evolución de los remanentes de forma que se encuentren aún en la fase Sedov-Taylor, es posible que el material del choque principal de cada remanente penetre en la cavidad del otro, formando así un objeto cuya apariencia parece unificada.

Como prueba de consistencia para el modelo analítico-numérico, se realizaron varias simulaciones con dos remanentes y se compararon los resultados con las simulaciones de baja resolución de Ikeuchi (1978). En la Tabla 1.1 se describen las características de cuatro modelos. En todos los casos el medio ambiente tiene una densidad de $n = 1.0 \text{ cm}^{-3}$ y una temperatura de 10^4 K .

En la Figura 1.13, se muestra la densidad numérica (en cm^{-3}) para el modelo SN01, en el cual los dos remanentes colisionan (a $t \approx 14 \text{ kyr}$) cuando aún se encuentran en la fase Sedov-Taylor (adiabática), en el tiempo $t = 55 \text{ kyr}$. Se ve inmediatamente que las ondas de choque de cada remanente penetran en la cavidad del otro remanente, produciendo una cavidad conjunta, lo cual podría conducir a la formación de túneles de baja densidad en el medio interestelar (Cox & Smith, 1974).

Por otro lado, la Figura 1.14 muestra lo que ocurre cuando los remanentes colisionan durante la fase radiativa (en ambos casos), correspondiente al modelo SN02. La figura

Modelo	E_{SN1} 10^{51} erg	E_{SN2} 10^{51} erg	t_{col} kyr	d pc	t_2 kyr	Fase Evolutiva
SN01	1.0	1.0	14	30.0	–	Sedov–Sedov
SN02	0.1	0.1	59	30.0	–	Rad–Rad
SN03	1.0	0.1	39	30.7	–	Sedov–Rad
SN04	0.5	0.5	20	15.0	20	Sedov–Sedov

Tabla 1.1: Resumen de parámetros de los cuatro modelos con dos remanentes. Las columnas E_{SN1} y E_{SN2} son las energías de las explosiones, en unidades de 10^{51} erg, d es la separación (en pc) entre los centros de las explosiones, t_{col} el tiempo aproximado (en kyr) al cual ocurre la colisión, t_2 el tiempo al cual explota la segunda supernova (para el modelo SN04), y la última columna denota la fase evolutiva en que se encuentra cada remanente al momento de ocurrir la colisión (donde “Rad” indica fase radiativa).

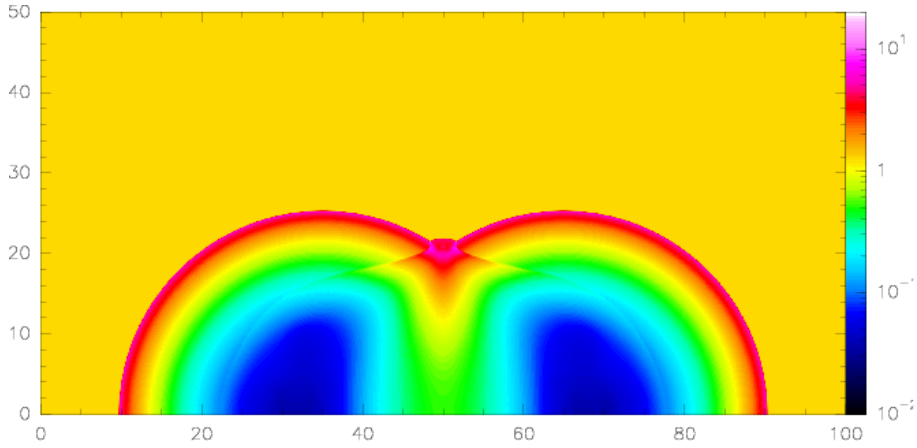


Figura 1.13: Mapa de densidad numérica (en cm^{-3}) para el modelo SN01, $t = 55$ kyr. La escala en los ejes está dada en pc. Los remanentes colisionan cuando aún se hayan en su fase de Sedov-Taylor (adiabática) y forman una cavidad continua después de la colisión.

muestra la densidad a $t = 100$ kyr, tiempo suficiente para que los dos remanentes hayan cambiado a fase radiativa (en la simulación, la transición ocurre a $t_{\text{rad}} \approx 35$ kyr). La colisión de los dos choques radiativos produce una pared densa ($n/n_0 > 40$) que separa las dos cavidades, impidiendo que el material de los remanentes se mezcle. Aunque en esta simulación los remanentes son idénticos y por lo tanto la pared permanece estática, en el caso en que los remanentes tengan distintas energías la pared se moverá hacia la cavidad dejada atrás por el remanente menos energético (como se ve en el modelo SN03, a continuación).

El caso en el cual un remanente se encuentra ya en fase radiativa mientras que el otro aún en la fase de Sedov-Taylor se muestra en la Figura 1.15, y corresponde al modelo SN03. En este caso, el remanente de la izquierda tiene una energía 10 veces menor (ver Tabla

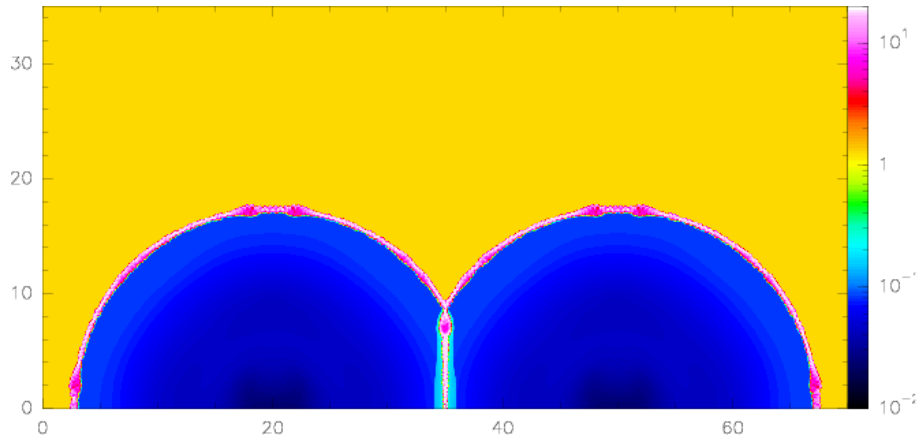


Figura 1.14: Mapa de densidad numérica (en cm^{-3}) para el modelo SN02, $t = 100$ kyr. La escala en los ejes está dada en pc. Los remanentes colisionan en la fase radiativa.

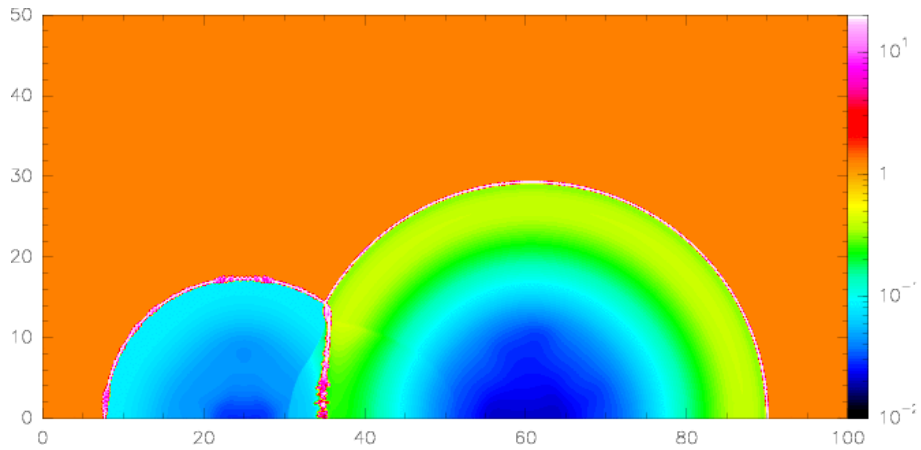


Figura 1.15: Mapa de densidad numérica (en cm^{-3}) para el modelo SN03, $t = 100$ kyr. La escala en los ejes está dada en pc. Cuando ocurre la colisión, uno de los remanentes está ya en fase radiativa mientras que el otro se encuentra aún en fase Sedov-Taylor.

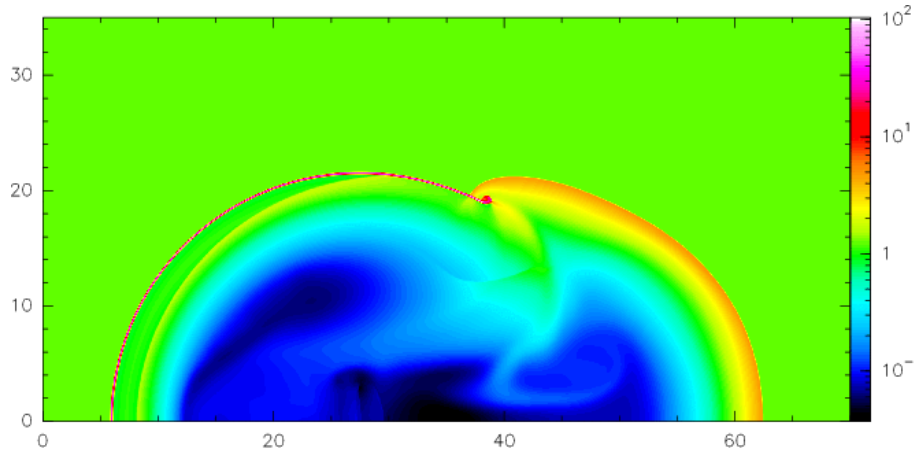


Figura 1.16: Mapa de densidad numérica (en cm^{-3}) para el modelo SN04, $t = 100$ kyr. La escala en los ejes está dada en pc. El segundo remanente explota justo sobre la onda de choque del primer remanente después de 20 kyr de haber detonado el primer remanente.

1.1) que el de la derecha, por lo que evoluciona más rápido y cambia a la fase radiativa (la transición ocurre a $t \approx 32$ kyr) antes de la colisión, mientras que su compañero más energético permanece en fase Sedov durante la colisión. El resultado no es muy distinto al del modelo anterior: el choque radiativo del remanente menos energético forma una pared muy densa que separa las dos cavidades, aunque en este caso la disparidad de energías produce que la pared se desplace hacia el interior del remanente menos energético (el de la izquierda en la figura).

Finalmente, en el modelo SN04 el segundo remanente explota 20 kyr después que el primero, y la separación entre los centros de las explosiones es tal que el lugar de explosión del segundo remanente coincide con la onda de choque del primero. En la Figura 1.16 se muestra la situación a $t = 100$ kyr. El efecto es similar al del modelo SN01, en el cual las ondas de choque de cara remanente penetran libremente en la cavidad producida por el otro remanente.

Bibliografía

- Arthur, S. J. 1991, The Magellanic Clouds, 148, 331
- Arthur, S. J. 2002, APSS, 281, 267
- Arthur, S. J., & Falle, S. A. E. G. 1991, MNRAS, 251, 93
- Arthur, S. J., & Falle, S. A. E. G. 1993, MNRAS, 261, 681
- Bandiera, R., & Petruk, O. 2004, A&A, 419, 419
- Bisnovatyi-Kogan, G.S., & Blinnikov, S.I. 1982, Soviet Astronomy Letters, 26, 530
- Blondin, J.M., Wright, E.B., Borkowski, K.J., & Reynolds, S.P. 1998, Apj, 500, 342
- Bodenheimer, P., Woosley, S.E. 1983, ApJ. 269, 281
- Burrows, A. On the Status of Core-Collapse Supernova Explosion Theory, Nuclei in the Cosmos (NIC XII), 2012
- Chevalier, R. A. 1974, ApJ, 188, 501
- Chevalier, R. A. 1977, ARA&A, 15, 175
- Cioffi, D.F., McKee, C.F., & Bertschinger, E. 1988, ApJ, 334, 252
- Cowie, L.L., & McKee, C.F. 1977, ApJ, 211, 135
- Cowie, L.L., McKee, C.F., & Ostriker, J.P. 1981, ApJ. 247, 908
- Cox, D. P., & Smith, B. W. 1974, ApJL, 189, L105
- Dalgarno, A., McCray, R. A. 1972, ARA&A, 10, 375

-
- Elmegreen B. G. & Scalo J. 2004, ARA&A, 42, 211
- Falle, S. A. E. G. 1981, MNRAS, 195, 1011
- Harten, A., Lax, P. D., van Leer, B. 1983, SIAM Rev., 25, 357
- Ikeuchi, S. 1978, Publ. Astron. Soc. Japan. 30, 563
- Jones, E.M., Smith, B.W., Straka, W.C., Kodis, J.W., Guitar, H. 1979, ApJ, 232, 129
- Kumar, H. S., & Safi-Harb, S. 2008, ApJL, 678, L43
- Loll, A. M., Hester, J., Sankrit, R., & Blair, W. 2006, Bulletin of the American Astronomical Society, 38, 150.23
- McKee, C.F., & Ostriker, J.P. 1977, ApJ, 218, 148
- McKee, C. F., & Ostriker, E. C. 2007, ARAA, 45, 565
- Reynolds, S. P. 2008, ARA&A, 46, 89
- Reynoso, E. M., Moffett, D. A., Goss, W. M., et al. 1997, ApJ, 491, 816
- Scalzo, R., Aldering, G., Antilogus, P., et al. 2014, MNRAS, 560
- Schneider, E. M., de La Fuente, E., & Velázquez, P. F. 2006, MNRAS, 371, 369
- Schure, K. M., Kosenko, D., Kaastra, J. S., Keppens, R., & Vink, J. 2009, A&A, 508, 751
- Shull, J. M., & McKee, C. F. 1979, ApJ, 227, 131
- Slavin, J. D., McKee, C. F., & Hollenbach, D. J. 2000, ApJ, 541, 218
- Sedov, L.I., Dokl. Akad. Nauk. SSSR, 52, 17, 1946
- Spitzer, L. Physics of fully ionized gases. 1962, Interscience Publishers, New York, ISBN 0470817232
- The formation of a blast wave by very intense explosion, I: Theoretical discussion. Proc of the Royal Society, London, Ser A, 201: 159-174
- Toro, E. F., Spruces, M., Speares, W. 1994, Shock Waves, 4, 25

- Toro E. F., Spruce M. & Spears W. 1994, *J. Shock Waves*, 4, 25–34
- Truelove, J.K. & McKee, C.F. 1999, *ApJS*, 120, 299
- Velázquez, P. F., de la Fuente, E., Rosado, M., Raga, A. C. 2001, *A&A*, 377, 1136
- Vigh, C. D., Velázquez, P. F., Gómez, D. O., et al. 2011, *ApJ*, 727, 32
- Vink, J. 2012, *A&AR*, 20, 49
- Woltjer, L. 1972, *A&AR*, 10, 129
- Yoshiike, S., Fukuda, T., Sano, H., et al. 2013, *ApJ*, 768, 179

Capítulo 2

El código Walicxe3D

2.1. Descripción General

Las simulaciones numéricas son una herramienta invaluable en astrofísica, pues permiten modelar el comportamiento de fluidos astrofísicos en un gran rango de contextos más allá de lo que es posible mediante soluciones analíticas. Para abarcar la gran diversidad de problemas astrofísicos, los cuales tienen escalas espaciales y temporales que abarcan un gran rango dinámico, se han propuesto una gran variedad de técnicas numéricas que pueden agruparse básicamente en tres grandes categorías: métodos sin malla (*gridless*), métodos de malla Lagrangianos y métodos de malla Euleriana.

Dentro de la primera categoría, quizás el ejemplo más importante son los métodos SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics; Gingold and Monaghan (1977) and Lucy (1977)), los cuales discretizan del fluido mediante partículas individuales a través de una función de suavizamiento conocida como *kernel*, y se resuelven las ecuaciones de la hidrodinámica en su forma Lagrangiana. La formulación con base en partículas se presta especialmente para integradores de gravedad de N-cuerpos, por lo que este tipo de códigos ha tenido éxito en aplicaciones dominadas por gravedad, como simulaciones cosmológicas. Quizás el ejemplo más conocido de este tipo de técnica es el código GADGET2 (Springel 2005).

Por otro lado, las técnicas basadas en la discretización del fluido en una malla discreta pueden distinguirse según la forma en que la malla se adapta al fluido: en el enfoque de malla Euleriana, la malla está espacialmente fija, mientras que en una malla Lagrangiana sigue al fluido conforme evoluciona. Estos dos enfoques tienen ventajas y desventajas

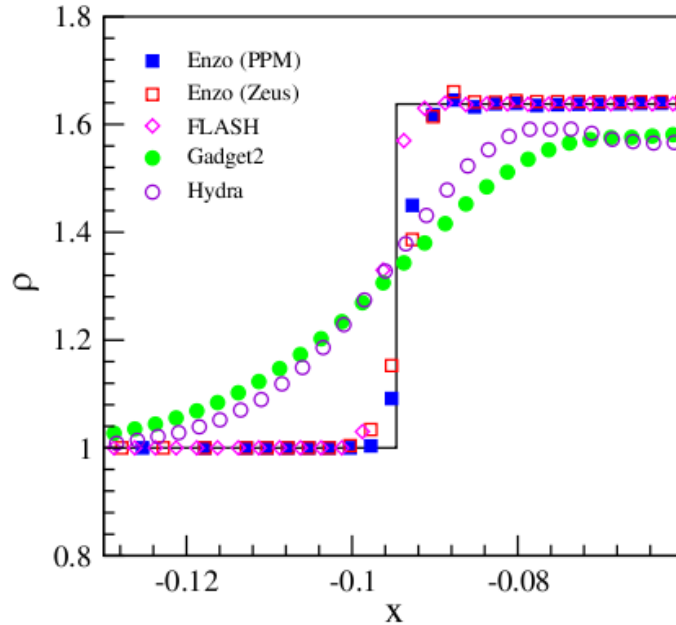


Figura 2.1: En esta prueba numérica, Tasker et al. (2008) comparan el desempeño de varios códigos hidrodinámicos de uso común. La prueba consiste en un tubo de choque (el cual se describe en la sección 2.6.1), del cual se puede obtener una solución (denotada por la línea continua). Los códigos Eulerianos (ENZO y FLASH) resuelven notablemente mejor el choque que los códigos SPH (GADGET2 e HYDRA).

complementarias. Los códigos Eulerianos tienden a tener una mayor precisión y mejores propiedades de conservación, mientras que los algoritmos Lagrangianos son usualmente menos difusivos, es decir, reproducen más precisamente discontinuidades del fluido (Maron & Howes 2003). Algunos ejemplos empleados actualmente de códigos de malla son ENZO (O’Shea et al. 2004), FLASH (Fryxell et al. 2000) y RAMSES (Teyssier 2002), entre otros.

La simulación de remanentes de supernova ocurre en un contexto astrofísico con características particulares. Por un lado, puesto que nuestra intención es estudiar la dinámica de ondas de choque, es importante que el tratamiento numérico reproduzca adecuadamente las discontinuidades del fluido causadas por choques supersónicos. En este respecto, los códigos de malla Euleriana producen resultados en general notablemente mejores que los códigos SPH. En la Figura 2.1 se muestra una comparación realizada por Tasker et al. (2008) entre varios códigos empleados actualmente. La prueba consiste en un tubo de choque (ver la sección 2.6.1 para una descripción de este tipo de pruebas) para un gas con $\gamma = 5/3$ con los estados iniciales $(\rho_L, P_L, u_L) = (4.0, 1.0, 0.0)$ y $(\rho_R, P_R, u_R) = (1.0, 0.1795, 0.0)$, y se

muestra aquí el choque que se propaga hacia la región de baja densidad. Para los códigos de malla se emplearon 400^3 celdas en el nivel más fino, mientras que para los SPH se emplearon 1 millón de partículas. La línea continua indica la densidad según la solución exacta esperada de este “tubo de choque”. Se aprecia que los códigos Eulerianos (ENZO y FLASH) resuelven notablemente mejor el choque que los códigos SPH (GADGET2 e HYDRA).

Al mismo tiempo, las altas velocidades y presiones térmicas típicas que ocurren en los RSNs hacen que la autogravedad del gas sea generalmente despreciable en las escalas de espaciales y temporales que nos interesan. Esto reduce la importancia de la facilidad existente en los códigos SPH para incluir la gravedad en el tratamiento hidrodinámico. Esto, junto al punto mencionado anteriormente, sugiere que un código de malla Euleriana es la opción más apropiada para estudiar la evolución de RSNs.

WALICXE3D es un nuevo código de malla Euleriana adaptiva basada en bloques y paralelizado con MPI que resuelve las ecuaciones de la hidrodinámica en tres dimensiones. Escrito en el estándar Fortran 90/95, el código se desarrolló como “sucesor espiritual” y expansión a tres dimensiones del código 2D WALICXE¹ desarrollado por Alejandro Esquivel (Esquivel 2010). Aunque WALICXE3D es un código nuevo, comparte varios aspectos de la filosofía de diseño con su predecesor, mejorando algunos elementos técnicos del programa.

La solución de las ecuaciones de la dinámica de gases puede hacerse, a elección del usuario, mediante el algoritmo HLL (Harten et al. 1983), el cual resuelve el problema de Riemann de forma robusta, o bien empleando una modificación del mismo denominada HLLC (Toro et al. 1994) que resuelve mejor las discontinuidades de contacto. La rutina de hidrodinámica está diseñada de forma modular, por lo que es sencillo reemplazarla por algún otro algoritmo. El código incluye una rutina de enfriamiento radiativo en equilibrio coronal. Una descripción de estos algoritmos se presenta en la sección 2.2.

La malla Euleriana en la cual se resuelve la hidrodinámica emplea la técnica Adaptive Mesh Refinement (AMR) para crear zonas locales de mayor resolución espacial en las regiones interesantes del flujo y al mismo tiempo mantener a baja resolución (lo cual es computacionalmente económico) zonas de poco interés. La malla de WALICXE3D tiene una estructura de bloques jerarquizados en un árbol binario (denominado comúnmente una estructura de *octree*). El algoritmo permite que cada bloque se refine en 8 bloques con

¹La palabra *walicxe* proviene del antiguo idioma de los Charrúa de Sudamérica, y quiere decir “hechicería”.

el doble de resolución en cada dirección espacial, y permite que una “familia” de 8 bloques sean reducidos a un solo bloque de resolución más baja cuando las condiciones físicas lo permiten. Una malla AMR permite realizar simulaciones a una resolución espacial efectiva mucho mayor que una malla fija. Se discute la malla en más detalle en la sección 2.3.

El código está diseñado para ejecutarse en paralelo en *clusters* de memoria compartida, permitiendo aprovechar los recursos de cómputo de alto desempeño. La paralelización se obtiene mediante la librería de bajo nivel Message Passing Interface (MPI). La distribución de la carga computacional entre los distintos elementos de cómputo se hace empleando una curva de Hilbert, lo cual asegura que los distintos procesos resuelven zonas espacialmente próximas y así minimizar las operaciones de comunicación. La sección 2.4 habla más a fondo sobre algunos de estos aspectos.

La salida de datos de WALICXE3D se puede hacer en un formato compacto “nativo” del propio código, o bien en formato VTK compatible con el programa de visualización científica VisIt, desarrollado por el Lawrence Livermore National Laboratory. VisIt permite visualizar y analizar datos científicos de simulaciones numéricas con mallas estructuradas y adaptivas. Además, contiene un gran número de herramientas para manipular datos en 2D y 3D.

En la Figura 2.2 se muestra un diagrama de flujo de alto nivel que resume el funcionamiento general del código WALICXE3D. Después de las inicializaciones generales, se impone la condición hidrodinámica inicial, o bien se cargan los datos de una salida anterior (permitiendo reanudar la ejecución o emplear datos obtenidos por una simulación previa). Realizado esto, se entra al ciclo principal de cómputo, el cual se repite hasta alcanzar el tiempo final de integración deseado. En el primer paso, las fronteras entre los bloques son intercambiadas, ya sea a través de una copia local o mediante mensajes de MPI. Después, se llama al integrador numérico, el cual avanza el estado de las variables hidrodinámicas y aplica el enfriamiento radiativo. Posteriormente, la malla adaptiva (AMR) se ajusta para seguir la evolución del fluido y se verifica que la carga computacional está adecuadamente balanceada. Al último, se realiza una salida de datos cuando sea pertinente.

Finalmente, es necesario comentar que existen varias razones que apoyan la motivación para desarrollar un código hidrodinámico para aplicaciones astrofísicas en lugar de emplear uno disponible públicamente. (1) En muchas ocasiones, el estudio de un problema particular requiere hacer modificaciones a una o varias partes del código hidrodinámico.

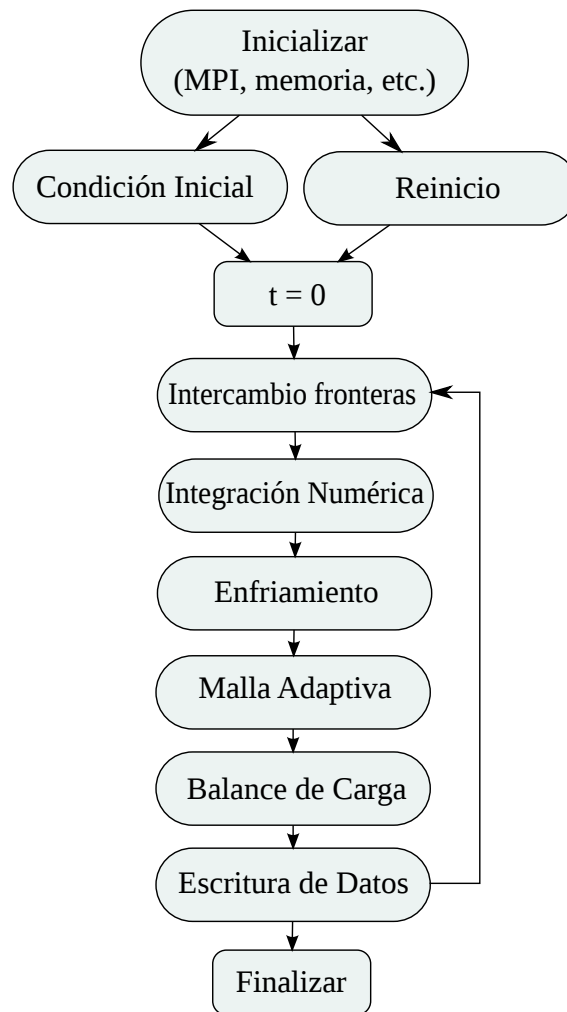


Figura 2.2: Diagrama de flujo que muestra el funcionamiento general del código WALICXE3D

Con un código desarrollado internamente, el proceso de modificación se puede hacer en una fracción del tiempo pues se tiene un conocimiento profundo del funcionamiento detallado de todas las partes. (2) El desarrollo de herramientas computacionales en astrofísica es una tarea crucial en la cual participa una porción reducida de la comunidad científica. Desarrollar un código nuevo de esta complejidad permitió familiarizarse con los algoritmos numéricos y técnicas computacionales que se emplean en la actualidad, y tuvo como resultado la adquisición de herramientas que podrían usarse a futuro en una gran gama de proyectos científicos.

2.2. Integrador Numérico

Daremos a continuación una descripción general del integrador numérico empleado por WALICXE3D. Las ecuaciones de Euler en coordenadas cartesianas 3D pueden escribirse como una *ley de conservación* de la manera siguiente:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = \mathbf{S}, \quad (2.1)$$

donde $\mathbf{U}$ es el vector de variables conservadas, $\mathbf{F}$, $\mathbf{G}$ y $\mathbf{H}$ son los flujos en las direcciones x , y y z , respectivamente, y $\mathbf{S}$ corresponde a los términos fuente. Estos vectores están dados por:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ E \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ P + \rho u^2 \\ \rho uv \\ \rho uw \\ u(E + P) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ P + \rho v^2 \\ \rho vw \\ v(E + P) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho vw \\ \rho vw \\ P + \rho w^2 \\ w(E + P) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

donde ρ es la densidad de masa, P la presión térmica, u , v y w son las componentes de la velocidad en las direcciones x , y y z , respectivamente, y $E = \rho e + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2 + w^2)$ es la densidad de energía total del gas, en donde e representa la densidad de energía interna

(térmica) del gas. Para cerrar este sistema se incluye una ecuación de estado; para las aplicaciones astrofísicas de este trabajo se empleó la del gas ideal: $P = \rho e(\gamma - 1)$. El vector de términos fuentes se escribe

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ G - L \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

donde G y L representan posibles ganancias y pérdidas de energía, respectivamente. Conviene también definir el vector $\mathbf{W}$ de variables primitivas,

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ v \\ w \\ P \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

La solución del sistema de ecuaciones (2.1) se hace mediante un método de volúmenes finitos de tipo Godunov. Este método fue inicialmente propuesto por Godunov (1959) y está diseñado especialmente para resolver problemas de dinámica de fluidos donde las soluciones presentan discontinuidades, como es el caso de los choques. Aunque el método original es de primer orden en tiempo y espacio, WALICXE3D emplea una extensión a segundo orden, la cual describiremos más adelante. Por economía de notación, daremos las expresiones del integrador numérico para el caso 1D, pues en la extensión a 3D se resuelve el problema de Riemann en cada una de las caras de las celdas computacionales por separado.

2.2.1. Método de Godunov

El método de volúmenes finitos de Godunov consiste tomar un promedio de las variables conservadas en un intervalo alrededor de cada punto x_i de la malla. La región sobre la cual se toma el promedio se denomina *celda* y se define como el intervalo $[x_i - \Delta x/2, x_i + \Delta x/2]$ (ver Figura 2.3), donde Δx es el espaciamiento (constante) entre los puntos de la

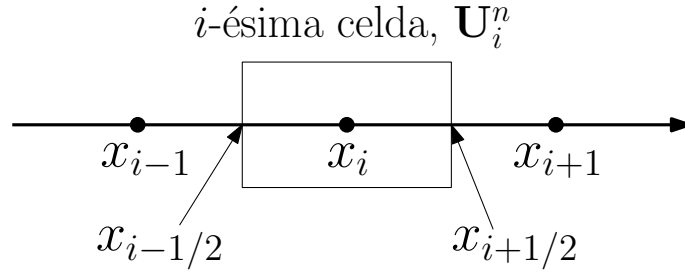


Figura 2.3: Promedio espacial de las variables conservadas sobre una *celda*.

mall. Definimos entonces las variables conservadas promediadas en la i -ésima celda para el tiempo t_n , $\mathbf{U}_i^n$, como

$$\mathbf{U}_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{U}(x, t) dx, \quad (2.5)$$

donde se usa la notación abreviada $x_{i\pm 1/2} \equiv x_i \pm \Delta x/2$.

Esta operación produce un dominio computacional en el que las variables del fluido están dadas por una función *constante a trozos*. Entre cada pareja de celdas, se define entonces una *interfase* en la cual las variables presentan una discontinuidad. Encontrar la evolución temporal a cada lado de una interfase que separa dos estados constantes se denomina *problema de Riemann*, y su solución (exacta y numérica) ha sido estudiada extensamente para una gran variedad de regímenes hidrodinámicos (e.g.: Roe 1981, Cocchi & Saurel 1997, Pons et al. 2000, Toro & Titarev 2002, Giacomazzo & Rezzolla 2006).

En el caso particular de las ecuaciones de Euler, la solución del problema de Riemann produce *tres* familias de ondas que se propagan a ambos lados de la interfase central, una para cada uno de los eigenvalores del sistema de ecuaciones $\lambda_1 = u - a$, $\lambda_2 = u$, $\lambda_3 = u + a$, donde $a = \sqrt{\gamma P / \rho}$ es la velocidad del sonido y u representa la velocidad del estado resuelto entre las ondas de los extremos. La Figura 2.4 muestra la estructura general de esta solución para el caso 1D. Las dos familias de ondas de los extremos pueden ser ondas de choque o bien ondas de rarefacción, mientras que la onda central es siempre una discontinuidad de contacto. Las tres familias de ondas definen cuatro regiones en las cuales las variables conservadas tienen valores constantes determinados por la solución exacta del problema. Tal estructura de ondas se denomina usualmente *Riemann fan*.

Para encontrar la evolución temporal de las ecuaciones de Euler mediante el método de

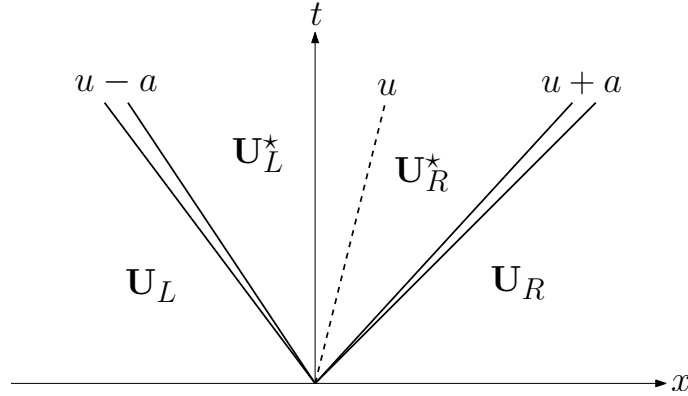


Figura 2.4: Esquema de la solución general del problema de Riemann para las ecuaciones de Euler. Se distinguen tres familias de ondas que se propagan a partir de la interfase central y que separan cuatro estados constantes.

Godunov se debe entonces resolver el problema de Riemann a cada lado de las interfases definidas por las celdas. Integrando el sistema de ecuaciones (2.1) sobre un volumen de control, se obtiene la *fórmula conservativa de Godunov*:

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i+1/2}} - \tilde{\mathbf{F}}_{x_{i-1/2}} \right) + \Delta t \tilde{\mathbf{S}}_i. \quad (2.6)$$

Los *flujos numéricos intercelda* $\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i+1/2}}$, $\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i-1/2}}$ corresponden a los promedios temporales sobre la celda de los flujos físicos, y se obtienen mediante las soluciones al problema de Riemann ($\mathcal{RP}$) a cada lado de la celda:

$$\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i+1/2}} = \mathcal{RP} [\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n], \quad (2.7)$$

$$\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i-1/2}} = \mathcal{RP} [\mathbf{U}_{i-1}^n, \mathbf{U}_i^n]. \quad (2.8)$$

Aunque se puede obtener una solución exacta al problema de Riemann de manera iterativa, tales soluciones son iterativas y en muchos casos pueden resultar costosas computacionalmente. Se opta entonces por emplear una *solución aproximada*. Al igual que su predecesor, WALICXE3D emplea los métodos aproximados HLL (Harten et al. 1983) y HLLC (Toro et al. 1994).

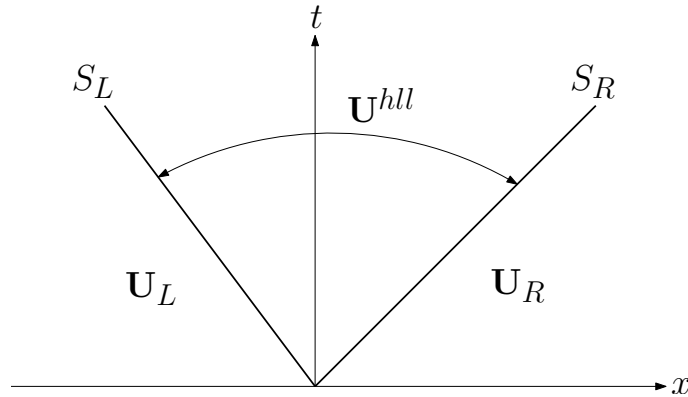


Figura 2.5: Esquema de la solución aproximada HLL para el problema de Riemann. Se sustituyen la compleja estructura entre las dos ondas en los extremos por un único estado constante $\mathbf{U}^{\text{hll}}$. Comparar con la Figura 2.4.

2.2.2. El algoritmo de Riemann aproximado HLL

El algoritmo HLL para resolver el problema de Riemann aproxima la solución completa al problema de Riemann mediante *dos* ondas que separan tres estados constantes. La aproximación principal del algoritmo HLL puede entenderse como el agrupar toda la estructura del *Riemann fan* entre las dos ondas de los extremos en un sólo estado central (ver Figura 2.5). Si las velocidades de propagación de estas dos ondas se denotan como S_L y S_R , con $S_L < 0 < S_R$, entonces la solución aproximada del problema de Riemann está dada por

$$\tilde{\mathbf{U}}(x, t) = \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{si } x \leq S_L t, \\ \mathbf{U}^{\text{hll}} & \text{si } S_L t \leq x \leq S_R t, \\ \mathbf{U}_R & \text{si } x \geq S_R t, \end{cases} \quad (2.9)$$

donde $\mathbf{U}_L$ y $\mathbf{U}_R$ son los estados constantes iniciales a cada lado de la interfase y $\mathbf{U}^{\text{hll}}$ es el estado aproximado en la región entre las dos ondas, el cual está dado por:

$$\mathbf{U}^{\text{hll}} = \frac{S_R \mathbf{U}_R - S_L \mathbf{U}_L + \mathbf{F}_L - \mathbf{F}_R}{S_R - S_L}. \quad (2.10)$$

Usando esta solución aproximada, se puede entonces escribir los flujos numéricos intercelda del método HLL:

$$\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i+1/2}}^{\text{hll}} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & \text{si } 0 \leq S_L, \\ \frac{S_R \mathbf{F}_L - S_L \mathbf{F}_R + S_L S_R (\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)}{S_R - S_L} & \text{si } S_L \leq 0 \leq S_R, \\ \mathbf{F}_R & \text{si } 0 \leq S_R. \end{cases} \quad (2.11)$$

Empleando esta expresión en la fórmula conservativa de Godunov, ec. (2.6), se obtiene entonces los nuevos valores de las variables conservadas al tiempo $t_{n+1} = t_n + \Delta t$. Para garantizar la estabilidad numérica del método, el paso de tiempo Δt empleado debe estar restringido por la condición de Courant-Friedrichs-Lewy (Courant et al. 1967) empleando la velocidad de propagación de las dos ondas,

$$\Delta t = \text{CFL} \times \frac{\Delta x}{|u|_{\max} + a}, \quad (2.12)$$

donde $|u|_{\max}$ es el valor máximo de la velocidad y el parámetro $\text{CFL} < 1$ se especifica en el código. En 3D, se calcula Δt en cada dirección cartesiana y se toma el mínimo de los tres.

Para terminar la especificación del método HLL, nos falta aún describir cómo se obtienen las velocidades de propagación de las dos ondas, S_L y S_R . WALICXE3D emplea una estimación directa propuesta por Davis (1988):

$$S_L = \min(u_L - a_L, u_R - a_R), \quad S_R = \max(u_L + a_L, u_R + a_R). \quad (2.13)$$

La rutina que estima las velocidades de las ondas está escrita de forma modular de manera que sea sencillo remplazar esta prescripción por una alternativa. Una comparación de varias formas de estimar las velocidades de ondas en el algoritmo HLLC puede ser consultada en Batten et al. (1997).

2.2.3. El algoritmo HLLC

Toro et al. (1994) propusieron el algoritmo HLLC, una modificación del algoritmo HLL que recupera la información de la discontinuidad de contacto en la solución aproximada

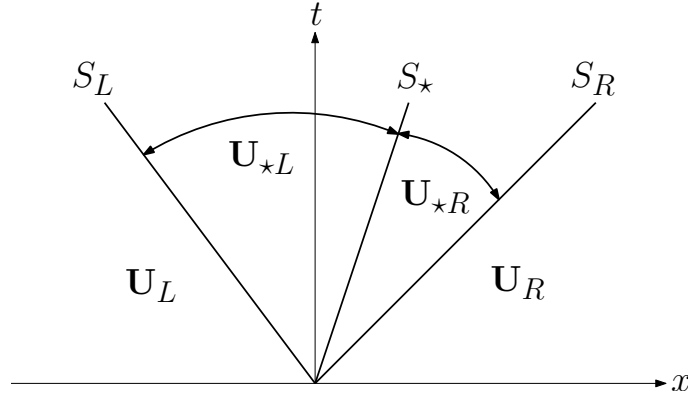


Figura 2.6: Esquema de la solución aproximada del algoritmo HLLC, el cual recupera la información de la discontinuidad de contacto central del problema de Riemann. Comparar con la Figura 2.5.

del problema de Riemann. WALICXE3D emplea este integrador por defecto pues es menos difusivo y captura mucho mejor discontinuidades de contacto como las que se forman en la región entre los choques de un RSN.

El HLLC sigue la misma línea que el HLL excepto que incluye la discontinuidad de contacto entre las ondas de los extremos que se propaga con velocidad S_* , produciendo así una solución del problema de Riemann con cuatro estados constantes separados por tres ondas (ver Figura 2.6). Los flujos numéricos intercelda se calculan mediante

$$\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i+1/2}}^{\text{hllc}} = \begin{cases} \mathbf{F}_L & \text{si } 0 \leq S_L, \\ \mathbf{F}_L + S_L(\mathbf{U}_{*L} - \mathbf{U}_L) & \text{si } S_L \leq 0 \leq S_*, \\ \mathbf{F}_R + S_R(\mathbf{U}_{*R} - \mathbf{U}_R) & \text{si } S_* \leq 0 \leq S_R, \\ \mathbf{F}_R & \text{si } 0 \geq S_R, \end{cases} \quad (2.14)$$

donde los estados $\mathbf{U}_*$ a cada lado de la discontinuidad de contacto están dados (en 3D) por

$$\mathbf{U}_{\star K} = \rho_K \left(\frac{S_K - u_K}{S_K - S_\star} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ S_\star \\ v_K \\ w_K \\ \frac{E_K}{\rho_K} + (S_\star - u_K) \left[S_\star + \frac{P_K}{\rho_K(S_L - u_K)} \right] \end{bmatrix}, \quad (2.15)$$

donde K es L o R , y la velocidad de la onda intermedia $S_\star$ se obtiene mediante

$$S_\star = \frac{P_R - P_L + \rho_L u_L (S_L - u_L) - \rho_R u_R (S_R - u_R)}{\rho_L (S_L - u_L) - \rho_R (S_R - u_R)}. \quad (2.16)$$

El efecto de la corrección introducida el HLLC puede observarse claramente en pruebas de tubo de choque discutidas en la sección 2.6.1.

2.2.4. Extensión a segundo orden

Para mejorar la calidad de las soluciones numéricas proporcionadas por los algoritmos HLL/HLLC al nivel requerido para obtener resultados de calidad científica, WALICXE3D extiende los algoritmos que acaban de ser descritos a segundo orden espacial y temporal siguiendo la metodología de Esquivel et al. (2010).

La extensión a segundo orden *temporal* se hace mediante un paso Runge-Kutta de segundo orden, el cual puede interpretarse como un algoritmo predictor-corrector. Es decir, primero se resuelven las ecuaciones para un *medio paso* $\Delta t/2$ usando las técnicas descritas en las secciones 2.2.2 y 2.2.3, produciendo las variables conservadas en $t_n + \Delta t/2$:

$$\mathbf{U}_i^{n+1/2} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i+1/2}} - \tilde{\mathbf{F}}_{x_{i-1/2}} \right) + \frac{\Delta t}{2} \tilde{\mathbf{S}}_i. \quad (2.17)$$

Con los valores $\mathbf{U}_i^{n+1/2}$, se obtiene un nuevo juego de variables primitivas $\mathbf{W}_i^{n+1/2}$. La extensión a segundo orden espacial se aplica entonces al interpolar los valores de las variables primitivas en las interfases de las celdas usando una reconstrucción a primer orden:

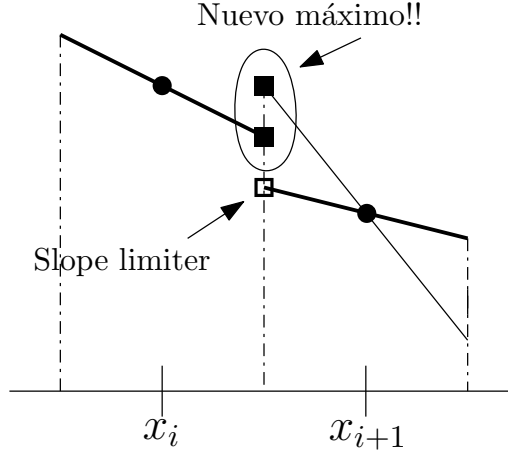


Figura 2.7: Al interpolar los valores de las celdas x_i y x_{i+1} a su interfase común (cuadros llenos), es posible que se cree un nuevo máximo, lo cual produce las oscilaciones espurias características de los métodos de alto orden. Un *slope limiter*, aplicado aquí al valor reconstruido de la celda de la derecha, permite minimizar este efecto limitando la pendiente usada en la reconstrucción de los valores en la interfase de forma a evitar nuevos extremos de las variables.

$$\mathbf{W}_{L,i}^{n+1/2} = \mathbf{W}_i^{n+1/2} - \frac{1}{2} \overline{\Delta \mathbf{W}}_i^{n+1/2}, \quad (2.18)$$

$$\mathbf{W}_{R,i}^{n+1/2} = \mathbf{W}_i^{n+1/2} + \frac{1}{2} \overline{\Delta \mathbf{W}}_i^{n+1/2}, \quad (2.19)$$

donde

$$\overline{\Delta \mathbf{W}}_i^{n+1/2} = \phi(\mathbf{W}_i^{n+1/2} - \mathbf{W}_{i-1}^{n+1/2}, \mathbf{W}_{i+1}^{n+1/2} - \mathbf{W}_i^{n+1/2}) \quad (2.20)$$

representa la pendiente promedio de las variables primitivas con respecto a las celdas a la izquierda y a la derecha de la celda central. Aquí, la función ϕ se denomina *slope limiter* y determina cómo se hace el promedio entre las pendientes estimadas a la izquierda y a la derecha.

El propósito del *slope limiter* es reducir las oscilaciones espurias que se introducen cerca de discontinuidades al resolver las ecuaciones de Euler a segundo orden. Estas oscilaciones son causadas cuando la interpolación de las primitivas en las fronteras de las celdas produce nuevos máximos o mínimos, como se muestra en la Figura 2.7. WALICXE3D cuenta con 6

Nombre	Slope limiter $\phi(a, b)$
Minmod	$s \times \max[0, \min(a , sb)], s = \text{sign}(a)$
van Leer	$\max\left(\frac{ab(a+b)}{a^2+b^2}, 0\right)$
van Albada	$\frac{a(b^2 + \epsilon) + b(a^2 + \epsilon)}{a^2 + b^2 \epsilon}, \epsilon \sim 10^{-7}$
UMIST	$\max[0, \min(2 a , 2sb, sc, sd)]$ $s = \text{sign}(a), c = a/4 + 3b/4, d = 3a/4 + b/4$
Woodward	$\max[0, \min(2 a , 2sb, sc)]$ $s = \text{sign}(a), c = (a+)/2$
Superbee	$s \times \max(0, c, d)$ $s = \text{sign}(b), c = \min(2 b , sa), d = \min(b , 2sa)$

Tabla 2.1: *Slope limiters* habilitados en WALICXE3D

diferentes slope limiters, los cuales están dados en la Tabla 2.1.

Una vez obtenidas las variables primitivas reconstruidas en las interfases, $\mathbf{W}_{L,i}^{n+1/2}$ y $\mathbf{W}_{R,i}^{n+1/2}$, se utilizan de nuevo en la prescripción del HLL/HLLC para obtener nuevos flujos numéricos intercelda actualizados, $\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i+1/2}}$ y $\tilde{\mathbf{F}}_{x_{i-1/2}}$. Finalmente, éstos se usan para avanzar las variables conservadas un paso de tiempo completo Δt mediante la fórmula conservativa (2.6).

2.2.5. Viscosidad artificial

Por último, cabe mencionar que el algoritmo numérico de WALICXE3D también incluye una corrección al final del paso de tiempo equivalente a introducir una viscosidad artificial a la solución. Esta corrección puede expresarse como

$$\mathbf{U}_i^{n+1/2} \leftarrow \mathbf{U}_i^{n+1/2} + \eta \nabla^2 \mathbf{U}_i^{n+1/2}, \quad (2.21)$$

donde la viscosidad artificial η es un parámetro adimensional ajustable por el usuario y típicamente tiene valores del orden de 10^{-3} . El operador Laplaciano se calcula de forma aproximada empleando una diferencia finita centrada de segundo orden. Esta corrección permite estabilizar la solución numérica de problemas con fuertes gradientes en las variables hidrodinámicas, en particular donde el enfriamiento radiativo se vuelve importante.

2.2.6. Enfriamiento radiativo

Además de la integración numérica de las ecuaciones de la hidrodinámica, WALICXE3D incluye una rutina de enfriamiento radiativo que calcula las pérdidas de energía térmica de las celdas debido a emisión de radiación. Para el caso de los plasmas astrofísicos en el medio interestelar, y particularmente para la expansión de remanentes de supernova, el *equilibrio de ionización colisional* (o *equilibrio coronal*, pues ocurre en el ambiente de la corona solar) es el régimen más adecuado para cuantificar las pérdidas radiativas. Este régimen se da cuando la densidad de electrones es demasiado baja para alcanzar el equilibrio termodinámico, de manera que los procesos dominantes que ocurren son la excitación/ionización colisional y la recombinación radiativa.

En el código, el enfriamiento se aplica calculando la pérdida de energía de cada celda después del paso hidrodinámico considerando que la tasa de enfriamiento (en $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-3}$) está dada por $n^2\Lambda(T)$, donde n es la densidad numérica de partículas del gas y $\Lambda(T)$ es una *función de enfriamiento* que sólo depende de la temperatura. Para calcular el cambio de temperatura de una celda, partimos de la tasa de cambio de la densidad de energía en función del tiempo, $de/dt = -n^2\Lambda(T)$, y suponemos que durante el pequeño intervalo de tiempo Δt el cambio de temperatura es pequeño, de forma que $\Lambda(T)$ se puede considerar aproximadamente lineal con la temperatura, es decir, que $\Lambda(T) \sim \Lambda(T_0) \cdot T/T_0$, donde T_0 es la temperatura del gas al principio del paso de tiempo. Integrando la ecuación diferencial resultante, se obtiene que la temperatura de la celda al final del paso de tiempo es:

$$T_f = T_0 \exp\left(\frac{-n^2\Lambda(T_0)\Delta t}{e_0}\right), \quad (2.22)$$

donde e_0 es la densidad de energía al principio del paso. De esta expresión se pueden obtener directamente los valores finales de la presión y energía de la celda después de la pérdida radiativa.

Para completar el tratamiento, es necesario especificar la función de enfriamiento $\Lambda(T)$ que caracteriza las pérdidas radiativas bajo el régimen de equilibrio de ionización colisional, el cual es apropiado para los parámetros típicos del gas del medio interestelar que estudiamos. La excitación colisional de hidrógeno y helio una vez ionizado dominan a temperaturas de $T \sim 10^{4.3}$ K y $T \sim 10^5$ K, respectivamente. Abajo de $T \sim 10^4$ K, el gas es neutro y las colisiones raramente son suficientemente energéticas para producir esta-

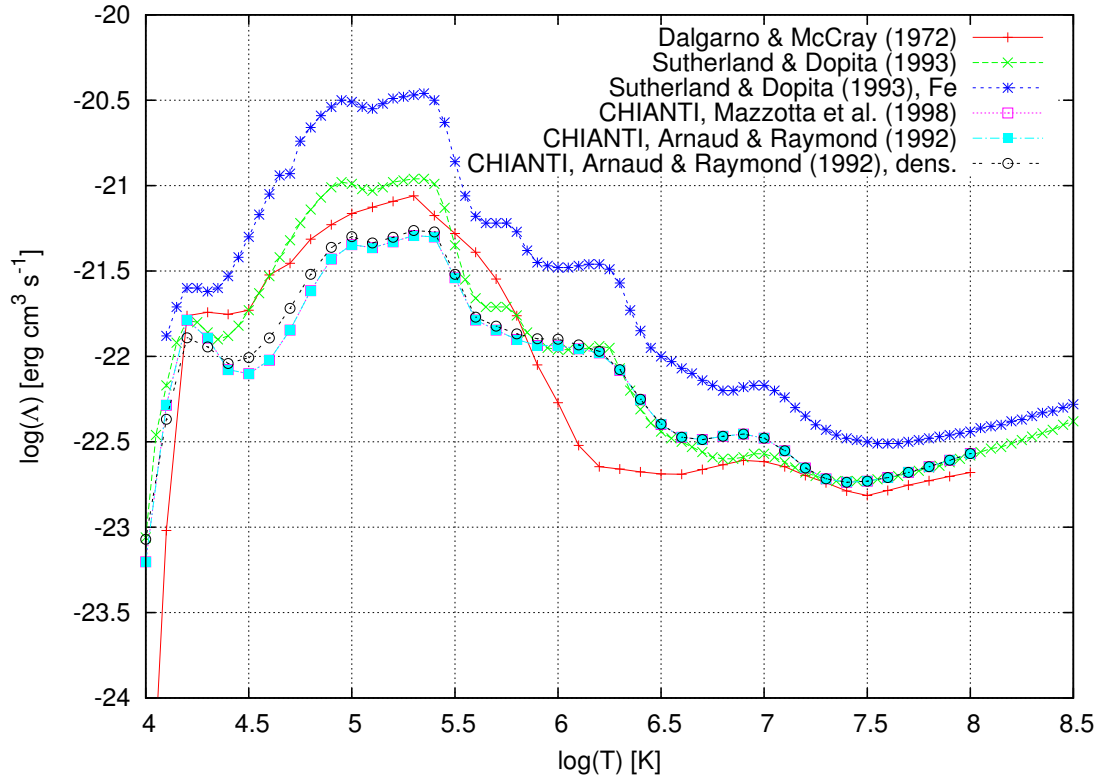


Figura 2.8: Funciones de enfriamiento $\Lambda(T)$ disponibles en el código, indicando en cada caso el origen de los datos. La función de Sutherland & Dopita (1993) indicada “Fe” fue calculada con un incremento en el contenido de hierro del gas, $[\text{Fe}/\text{H}] = +0.5$. Las funciones de CHIANTI fueron calculadas empleando las tablas de equilibrio de ionización indicadas. En la última, indicada “dens.”, se calculó la tabla de ionización suponiendo densidades bajas ($\sim 1 \text{ cm}^{-3}$) que son más representativas de las condiciones del medio en los estudios de este trabajo.

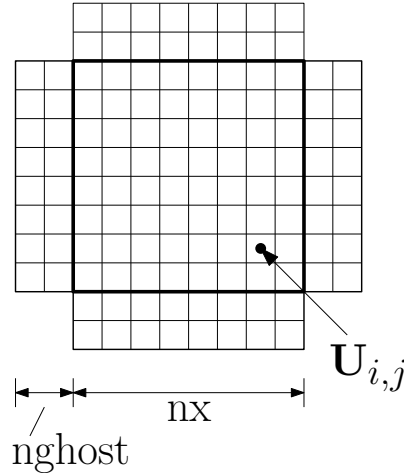


Figura 2.9: El *bloque*, mostrado aquí en su equivalente 2D, es la estructura de datos básica de WALICXE3D.

dos excitados, por lo que la tasa de enfriamiento se vuelve muy pequeña. A temperaturas $T \gtrsim 10^6$ K, el gas está totalmente ionizado y la emisión libre-libre se vuelve la contribución dominante.

El código cuenta con varias funciones de enfriamiento tabuladas: la función de Dalgarno & McCray (1972), dos funciones de Sutherland & Dopita (1993), una de ellas con alto contenido de hierro, y tres funciones calculadas mediante la librería atómica CHIANTI (Dere et al. 1997; Landi et al. 2006) empleando distintas tablas para el equilibrio de ionización (Arnaud & Raymond 1992 y Mazzotta et al. 1998). Estas funciones se encuentran graficadas en la Figura 2.8. La rutina de enfriamiento interpola $\Lambda(T)$ usando los valores de la tabla cuando la temperatura está en el rango 10^4 – 10^8 K. Si la temperatura es menor a 10^4 K, el enfriamiento se apaga, y para temperaturas mayores a 10^8 K, se emplea el valor correspondiente a la emisión libre-libre, para la cual $\Lambda(T) \propto \sqrt{T}$.

2.3. Malla Adaptiva

La malla de WALICXE3D emplea la técnica AMR (Adaptive Mesh Refinement) propuesta inicialmente por Berger & Colella (1989) para ajustar automáticamente la resolución de la malla según los gradientes locales de las variables hidrodinámicas. Esto se logra a través de una malla adaptiva basada en *bloques*.

Un *bloque* es la estructura fundamental de datos en la que está subdividida la malla. Un

bloque está compuesto por un arreglo cúbico de n_x^3 *celdas físicas*, donde n_x es el número de celdas en cada dirección, así como 6 capas de *celdas fantasma*, una en cada una de las caras del arreglo de celdas físicas, siendo el grosor de las capas de celdas fantasma igual al orden (espacial) del integrador numérico empleado (en el caso de los algoritmos HLL/HLLC de segundo orden implementados en el código, este número es dos). Por ejemplo, en la Figura 2.9 se muestra un bloque (representado en 2D por claridad) que contiene 8 celdas físicas por lado más dos celdas fantasma en cada cara.

Las variables hidrodinámicas se definen en el centro de cada celda. Las celdas fantasma son contenedores que permiten almacenar las condiciones a la frontera del bloque previo a la integración de las variables de flujo en las celdas físicas. Como cada bloque contiene sus propias celdas fantasma, representa una unidad de datos autocontenida que se envía íntegramente al algoritmo numérico para avanzar temporalmente las variables físicas en su interior.

2.3.1. Refinamiento y desrefinamiento

Con el fin de adaptar la resolución espacial de la malla al problema físico, cada bloque puede subdividirse de una manera binaria en 8 bloques *hijos* cuyos lados miden la mitad de los lados del bloque *padre*. Como el número de celdas en cada bloque es fijo, los bloques hijos discretizan el fluido con el doble de resolución espacial que el bloque padre. El *nivel de refinamiento* de un bloque indica el número de ancestros que tiene: los bloques de nivel 1 no tienen ancestros y se encuentran en el nivel “base” de la malla, sus bloques hijos están en el nivel 2, los hijos de sus hijos en el nivel 3, y así sucesivamente.

Durante el proceso de refinamiento las variables hidrodinámicas (es decir, las variables conservadas $\mathbf{U}$) del bloque padre son copiadas celda por celda a las celdas de los bloques hijos. Terminado el proceso de creación de los bloques hijos, el bloque padre es eliminado de la malla y deja de ocupar memoria RAM. En WALICXE3D solamente los bloques *hoja* (aquellos que no han producido hijos) están activos, mientras que los demás bloques del árbol no existen físicamente en la memoria. Como se verá más adelante, la manera en que el código representa las relaciones entre los bloques no requiere de una estructura de datos persistente que contenga la historia completa de descendencia de bloques.

En la Figura 2.10 se muestra esquemáticamente (en 2D, por claridad) un ejemplo del proceso de refinamiento binario (a partir de un único bloque inicial). Este proceso de

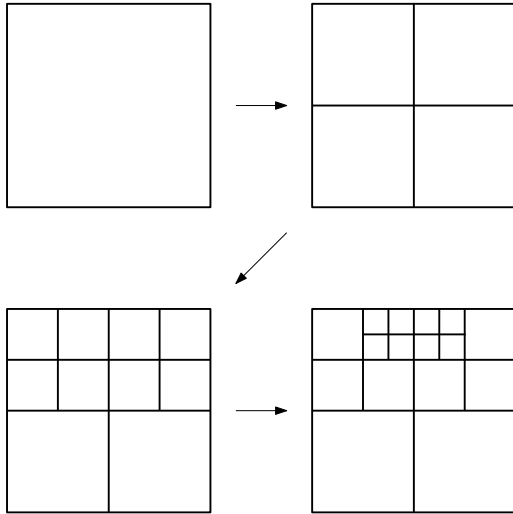


Figura 2.10: Refinamiento de la malla adaptativa en 2D a partir de un único bloque raíz y hasta cuatro niveles de refinamiento. Cada cuadro representa un bloque, es decir, un arreglo de $n \times 3$ celdas físicas más celdas fantasma asociadas. En este ejemplo, la región física de interés está en la parte superior y al centro del dominio computacional.

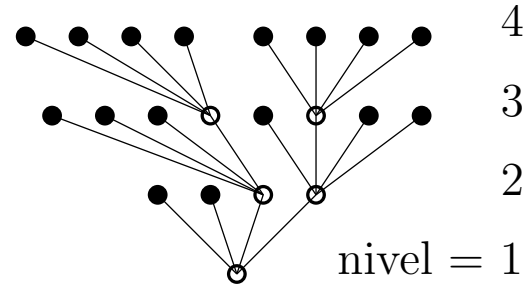


Figura 2.11: Estructura de árbol correspondiente al refinamiento mostrado en la Figura 2.10. Los círculos llenos indican los bloques “hoja” que están activos y los círculos vacíos indican bloques que fueron refinados y que ya no existen en la malla.

división puede representarse por medio de una estructura de tipo árbol, donde las ramas se subdividen de forma binaria. En tres dimensiones, tal estructura se denomina un *octree*, pues cada rama del árbol puede dar nacimiento a ocho ramas nuevas. En la Figura 2.11 se muestra el diagrama de árbol correspondiente a la descomposición de la malla de la Figura 2.10. Los círculos llenos representan bloques “hoja” mientras que los vacíos son bloques padre inexistentes. Una malla uniforme con la misma resolución que esta malla adaptativa requeriría 16^4 bloques en lugar de los 16 mostrados en este ejemplo. La ventaja de emplear una malla que solamente se refina donde es necesario se vuelve inmediatamente obvia.

Para determinar si un bloque debe ser refinado, una subrutina de refinamiento estima el gradiente relativo máximo de las primitivas en todo el bloque mediante diferencias finitas, e.g., en 1D se calcularía

$$\nabla W_{\max} = \max_{i,\alpha} \left\{ \left| \frac{W_{\alpha,i+1} - W_{\alpha,i-1}}{2\Delta x(\text{lev})W_{\alpha,i}} \right| \right\}, \quad (2.23)$$

donde la notación $W_{\alpha,i}$ indica el valor de la componente α de las variables primitivas en la

celda i y $\Delta x(\text{lev})$ es el espaciamiento entre celdas para el nivel lev de refinamiento. Entonces, se marca el bloque para refinamiento si $\nabla W_{\max}$ excede un valor umbral `refThres` definido por el usuario, el cual es típicamente del orden de 0.1.

La malla también permite el proceso contrario al refinamiento, en el cual 8 bloques hijos son combinados para producir de vuelta un bloque padre, sujeto a que las variables hidrodinámicas que contienen sean lo suficientemente suaves. Esto se logra siguiendo una técnica análoga a la de refinamiento: se estima el gradiente relativo máximo en cada bloque y se marca el bloque para “desrefinamiento” si el gradiente máximo está por debajo de otro valor umbral definido por el usuario, `coarseThres`, el cual debe ser menor que `refThres`; típicamente su valor es del orden de 0.01.

A diferencia del proceso de refinamiento, el cual puede ocurrir para cada bloque individual de forma independiente a los demás, para el proceso opuesto se pide que los *ocho* bloques de una misma familia cumplan la condición de “desrefinamiento” de manera simultánea. Las variables de flujo del nuevo bloque padre son obtenidas promediando los valores de las celdas de los bloques hijos, y una vez completado esto los bloques hijos son eliminados de la malla.

Por último, para impedir cambios bruscos de resolución en las fronteras entre bloques, se impone la restricción de que *los niveles de refinamiento de dos bloques espacialmente contiguos nunca difieran en más de un nivel* (e.g. Raga et al. 2000; Esquivel et al. 2010). Para hacer esto, se revisan los vecinos de cada bloque que ha sido marcado para refinamiento con base en los gradientes de sus variables físicas. La restricción se articula entonces de dos maneras: (1) se asegura que los vecinos que estén en un nivel de refinamiento más bajo estén marcados para refinar, y (2) se inhibe el desrefinamiento programado de espacialmente contiguos que se encuentran en el mismo nivel de refinamiento. Puesto que la aplicación de estos criterios cambia el programa de refinamiento y desrefinamiento de la malla, el proceso se repite de manera recursiva en todos los niveles hasta que todos los cambios programados satisfacen la restricción.

En la Figura 2.12 se muestra un ejemplo sencillo de este algoritmo. Las flechas indican el estado programado de refinamiento/desrefinamiento de los bloques, donde una flecha hacia arriba implica que el bloque está programado para refinamiento (a un nivel más alto) mientras que una flecha hacia abajo indica desrefinamiento. Suponiendo que los gradientes físicos han producido el programa del panel 2.12a, el algoritmo resultaría en dos cambios

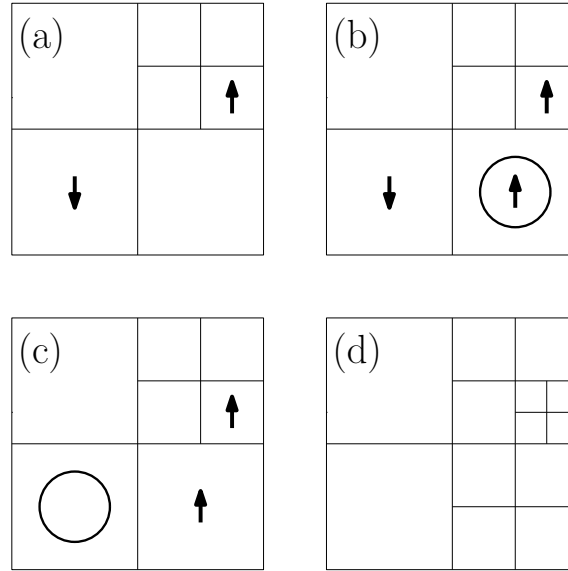


Figura 2.12: Ejemplo de la aplicación de la restricción al nivel de refinamiento de bloques vecinos; ver texto.

(indicados con círculos): marcaría para refinar el bloque inferior derecho (2.12b) e inhibiría la marca para desrefinamiento del bloque inferior izquierdo (2.12c). El resultado final sería el mostrado en el panel 2.12d, en el cual todos los bloques cumplen la restricción.

2.3.2. Sistema de identificadores universales (bIDs)

Un aspecto importante y no-trivial de una malla AMR es mantener la información que describe las relaciones espaciales y de descendencia entre los bloques, así como actualizarla conforme la malla es modificada. Por ejemplo, para la integración hidrodinámica de cada bloque es necesario obtener condiciones de frontera, y esto requiere que se conozca la identidad de sus bloques vecinos. WALICXE3D logra esto mediante un sistema de identificadores universales de bloque denominados “block IDs” (bID).

En este sistema, cada bloque está identificado por un número entero a partir del cual se pueden calcular todas las propiedades necesarias del bloque, como son: (i) el nivel de la malla en el que se encuentra el bloque (esto determina, por ejemplo, su extensión física); (ii) la posición física del bloque con respecto a las fronteras del dominio computacional (lo que permite determinar, por ejemplo, la posición física de celdas individuales); (iii) los bIDs de los bloques vecinos en cualquier nivel de refinamiento (necesario para el intercambio de fronteras); (iv) los bIDs de los bloques virtuales hijos y del bloque virtual padre

(necesario para refinar o desrefinar). En lugar de almacenar y mantener esta información, WALICXE3D almacena solamente el identificador universal de cada bloque activo, con el que se puede calcular cualquiera de estas propiedades a pedido por medio de operaciones aritméticas eficientes.

Los bIDs enumeran de forma virtual *todos* los bloques que pueden existir en la malla en todos los niveles de refinamiento. La numeración sigue un orden secuencial cartesiano (primero a lo largo del eje x , luego a lo largo de y y finalmente a lo largo de z) empezando en el nivel raíz de la malla (nivel 1) y continuando secuencialmente en todos los niveles superiores de refinamiento. Este sistema tiene varias ventajas con respecto a un sistema en el que las relaciones entre bloques se almacenan en una estructura de datos que es actualizada cada vez que se modifica la malla (como es el caso del código WALICXE):

1. **Simple:** se evita el proceso de actualización de una estructura de datos que contenga las relaciones entre los bloques, lo cual puede ser complicado. Todo lo que se requiere es mantener una lista de los bIDs que están activos, pues todas las relaciones pueden ser calculadas a partir de los bIDs.
2. **Compacto:** toda la información de la estructura de la malla AMR está contenida en la lista de bIDs activos (y parámetros fijos de la malla inicial), por lo que se requiere muy poco espacio de almacenamiento y es muy compacto escribir la información de la estructura completa a un archivo.

Estas ventajas, sin embargo, también implican ciertas desventajas que se comentan a continuación, aunque se considera que ninguna representa un problema serio. (1) Las variables hidrodinámicas de cada bloque no tienen una posición fija en la memoria RAM, por lo que es necesario hacer búsqueda sobre la lista de bIDs para poder recuperarlas. Sin embargo, el número de bloques activos es típicamente no muy grande (a final de cuentas, ese es el punto de una malla AMR) y hacer una búsqueda lineal en una lista de algunos miles de elementos es muy rápido (a pesar de ser $\mathcal{O}(N)$). Si fuera necesario mejorar este aspecto, se puede implementar un algoritmo de búsqueda binaria, el cual es mucho más eficiente para listas grandes ($\mathcal{O}(\log N)$); en la práctica se ha encontrado que esto no es aún necesario. (2) Se debe calcular las relaciones entre bloques en lugar de leerlas de un arreglo. Sin embargo, debido a la arquitectura de las computadoras modernas, es en muchas ocasiones considerablemente más rápido hacer operaciones aritméticas que leer de un arreglo

grande en memoria RAM. (3) Los bIDs se almacenan como enteros de 4 bytes, lo que limita el código a ~ 13 niveles de refinamiento debido a la naturaleza exponencial del número de bloques en niveles sucesivos. Sin embargo, 13 niveles de refinamiento es suficiente para lo que es práctico actualmente. Por ejemplo, si se inicia con un único bloque raíz que contiene 16^3 celdas, con 13 niveles de refinamiento se obtendría una resolución equivalente a 65536^3 , lo cual rebasa por mucho las capacidades de cómputo actuales. Además, esta restricción es muy fácil de evadir convirtiendo los bIDs a tripletas de números enteros en lugar de números únicos, o empleando enteros de 8 bytes.

Para dar a entender mejor este sistema de bIDs, a continuación se describen algunos de los algoritmos para extraer la información de la malla a partir de los bIDs, y se da un ejemplo concreto de los resultados que esto produce. Emplearemos un ejemplo en 2D ya que es más sencillo de visualizar, a sabiendas de que el código realiza lo que se describe en 3D (el sistema y los algoritmos presentados aquí se extienden fácilmente a cualquier número de dimensiones).

El sistema se basa en asignar (virtualmente) un número secuencial (el bID) a cada uno de los bloques que *pueden* existir potencialmente en todos los niveles de refinamiento. Para una malla 2D que tiene solo un bloque en la malla más gruesa (la malla “raíz”) y $nlev = 3$ niveles de refinamiento, la numeración resultante se muestra en la Figura 2.13a. Definimos $nbrotx = 1$ y $nbrooty = 1$ como el número de bloques raíz a lo largo de cada dimensión.

Nótese que estos son los bloques que *potencialmente* pueden existir, y que nunca pueden existir todos simultáneamente en un instante dado de la simulación. Cuáles existen y cuáles no está determinado por el estado actual del problema físico. Supongamos en este ejemplo que el problema conduce al refinamiento mostrado en la Figura 2.13b. Solamente estos bloques están activos, lo que quiere decir que solamente ellos almacenan en memoria los valores de las variables hidrodinámicas y que sólo ellos se integran numéricamente en cada paso de tiempo.

Lo importante es que en este sistema la estructura de la malla está determinada completamente si se conoce la lista de bIDs activos, $activeBIDs = \{2, 4, 5, 8, 9, 12, 13\}$ en nuestro ejemplo, así como la geometría de la malla raíz, la cual está especificada por las constantes $nbrotx$, $nbrooty$ y $nlev$. Puesto que la malla es binaria, el número de bloques posibles a lo largo de cada dimensión en el nivel de refinamiento l (donde

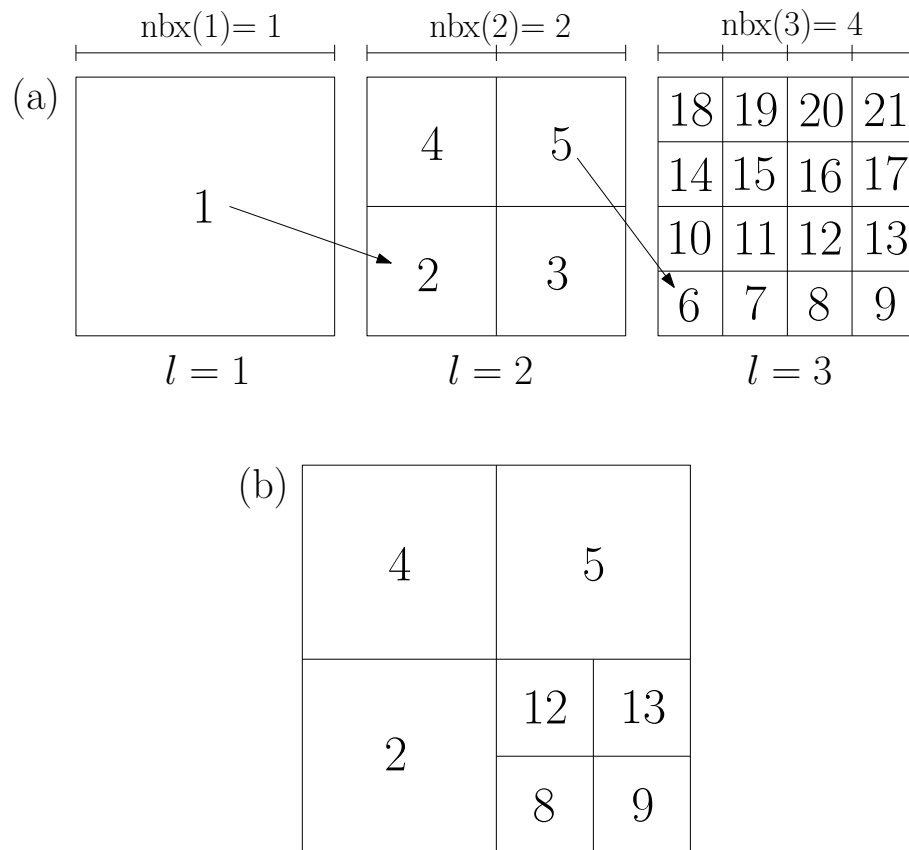


Figura 2.13: Ejemplo del sistema de bIDs. (a) Numeración virtual de todos los bloques para una malla bidimensional con 3 niveles de refinamiento y un sólo bloque raíz. (b) Un ejemplo de la malla refinada que podría ocurrir, donde los bloques mostrados son los bloques activos; ver texto para más detalles.

$l = 1$ es el nivel raíz) es $\text{nbx}(l) = \text{nbrootx} \times 2^{l-1}$ y $\text{nby}(l) = \text{nbrooty} \times 2^{l-1}$. El número total de bloques en cada nivel está dado por el producto de estas dos cantidades, $\text{nblockslev}(l) = \text{nbrootx} \times \text{nbrooty} \times (2^2)^{l-1}$, y partir de esto se puede calcular el bID del primer bloque de cada nivel como $\text{firstbID}(l) = \sum_{i=1}^{l-1} \text{nblockslev}(i) + 1$. En nuestro ejemplo (Figura 2.13), tenemos entonces que tanto $\text{nbx}(i)$ como $\text{nby}(l)$ valen $\{1, 2, 4\}$ para $l = \{1, 2, 3\}$, respectivamente, que $\text{nblockslev}(l)$ es $\{1, 4, 16\}$ y que $\text{firstbID}(l)$ es $\{1, 2, 6\}$.

A continuación se dan algunos ejemplos de la información que puede extraerse a partir del bID. Si queremos encontrar el nivel de refinamiento del bloque bID, empleamos el siguiente algoritmo:

```
función MESHLEVEL (bID) :
  para i desde 1 hasta nlev hacer :
    si bID  $\geq$  firstbID(i) y bID < firstbID(i)+nblockslev(i) :
      devolver i
```

Para obtener el bID del bloque padre, se usa:

```
función FATHER (bID) :
  ilev  $\leftarrow$  meshlevel (bID)
  si ilev es 1:
    devolver -1      (los bloques raíz no tienen padres)
  x,y  $\leftarrow$  bcoords (bID)
  xp  $\leftarrow$   $\lfloor (x+1)/2 \rfloor$ 
  yp  $\leftarrow$   $\lfloor (y+1)/2 \rfloor$ 
  devolver firstbID(ilev-1) + (xp-1) + (yp-1)*nbx(i)
```

donde la función bcoords devuelve dos coordenadas (x, y) que indican su posición en su propio nivel, y está dada por:

```
función BCOORDS (bID) :
  ilev  $\leftarrow$  meshlevel (bID)
  nx  $\leftarrow$  nbx (ilev)
  ny  $\leftarrow$  nby (ilev)
```

```

lID ← 1 + bID - firstbID(ilev)
x ← lID mod nx
si x es 0: x ← nx
y ← [lID/nx] mod ny
si y es 0: y ← ny
devolver x, y

```

Para obtener los vecinos de un bloque en el mismo nivel de refinamiento, se invoca:

```

función NEIGHBOR (bID, direccion):
    ilev ← meshlevel (bID)
    x,y ← bcoords (bID)
    si direccion es "izquierda":
        si x es 1: devolver -1      (borde del dominio computacional)
        si no:      x ← x-1
    si direccion es "derecha":
        si x es nx: devolver -1
        si no:      x ← x+1
    si direccion es "abajo":
        si y es 1: devolver -1
        si no:      y ← y-1
    si direccion es "arriba":
        si y es ny: devolver -1
        si no:      y ← y+1
    devolver firstbID(ilev) + (x-1) + (y-1)*nbx(i)

```

Existen algoritmos similares para calcular otras relaciones de la malla, como son, por ejemplo: determinar el bID del primer bloque “hijo” de un bloque dado, los bIDs de los “hermanos”, los bIDs de los vecinos en otro nivel de refinamiento, la posición física del bloque o de una celda dentro de un bloque, etc.

Veamos entonces las relaciones que se obtienen a partir de los bIDs en nuestra malla de ejemplo. Enfoquémonos primero en el bloque **5** de la Figura 2.13b. A partir del bID y de la geometría de la malla raíz (la cual no cambia), empleando algoritmos simples como los mostrados arriba obtenemos que:

- el nivel de refinamiento es 2
- el padre es el bloque 1
- los hijos son los bloques 16, 17, 20 y 21
- los hermanos son los bloques 2, 3 y 4
- los vecinos en el mismo nivel son 4 (izquierda), 3 (abajo) y el borde del dominio (arriba y derecha)

Si queremos determinar los vecinos *activos* del bloque **5**, basta con revisar cuáles bloques en el mismo nivel, un nivel arriba o un nivel abajo están activos. Así, concluiríamos que los vecinos *activos* del bloque **5** son los bloques 4 (izquierda), 12 y 13 (abajo) y borde del dominio arriba y a la derecha.

Similarmente, para el bloque **12**, obtendríamos que:

- el nivel de refinamiento es 3
- el padre es el bloque 3
- el bloque no tiene hijos pues pertenece a la malla más fina
- los hermanos son los bloques 8, 9 y 13
- los vecinos en el mismo nivel son 11 (izquierda), 13 (derecha), 8 (abajo) y 16 (arriba)

Además, conociendo la lista de bloques activos concluiríamos que los vecinos *activos* son los bloques 2 (izquierda), 5 (arriba), 13 (derecha) y 8 (abajo).

2.3.3. Condiciones de frontera

La integración de las variables de flujo en las celdas físicas de un bloque requiere condiciones de frontera. Estas condiciones son impuestas sobre las celdas fantasma del bloque antes de que sea pasado al integrador numérico. Por un lado, cuando el bloque se encuentra en el borde del dominio computacional se impone una condición predefinida, que representa la condición de frontera del problema matemático. WALICXE3D cuenta con tres condiciones de frontera de dominio predefinidas:

1. *Salida libre*: se permite que el flujo salga libremente del dominio computacional, lo cual requiere que el gradiente sea cero en la frontera. Esto se logra copiando los valores de las primitivas en la última celda física sobre las celdas fantasma.
2. *Reflexión*: el flujo al otro lado de la frontera es simétrico por reflexión. En esta condición, la componente de la velocidad normal a la frontera se invierte, mientras que las demás variables primitivas no son alteradas. El efecto es similar a una pared que confina el fluido dentro del dominio computacional.
3. *Periódica*: el dominio computacional es cíclico en las direcciones cartesianas, por lo que las condiciones en una frontera se copian de las celdas físicas de los bloques en la frontera opuesta. Esto se logra transparentemente (para los bloques) en la subrutina que determina los vecinos de un bloque.

Por otro lado, puesto que los datos están subdivididos en bloques discretos, cada bloque al interior del dominio requiere conocer los valores a la frontera de sus bloques vecinos. WALICXE3D intercambia estas fronteras internas antes de la integración hidrodinámica, realizando las operaciones necesarias de interpolación cuando existen diferencias en el nivel de refinamiento entre bloques vecinos. Estos intercambios pueden ser locales cuando los bloques pertenecen al mismo proceso o bien hacerse a través de paso de mensajes cuando los bloques pertenecen a distintos procesos.

2.4. Paralelismo

WALICXE3D es un código fundamentalmente paralelo, lo que quiere decir que la carga computacional se divide en un número `nProcs` de *procesos* independientes que se ejecutan en paralelo. Los procesos pueden ser hilos de ejecución de una sola computadora o pueden estar distribuidos entre varios nodos de un *cluster* de cómputo. La comunicación entre procesos se logra mediante la librería de paso de mensajes MPI, la cual es una librería de bajo nivel que permite el intercambio de información a través de mensajes explícitos entre procesos.

Un aspecto central del paralelismo de un código hidrodinámica es la distribución de la carga computacional (*load balancing*) entre los distintos procesos. En este caso, el total de bloques en que ha sido dividida la malla debe ser distribuido entre los procesos que se

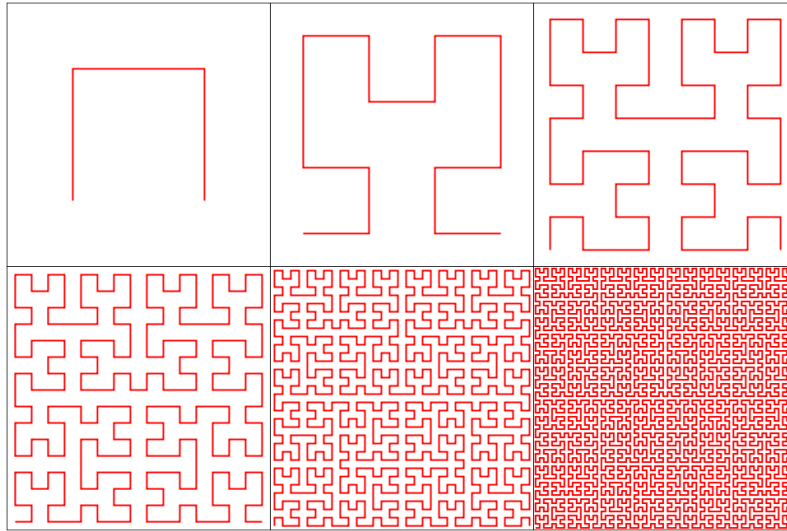


Figura 2.14: Las primeras 6 iteraciones de la construcción de la curva de Hilbert en 2D. WALICXE3D construye el análogo tridimensional del proceso mostrado aquí en el dominio computacional y emplea la curva resultante para distribuir los bloques entre los procesos que se ejecutan en paralelo.

ejecutan en paralelo. Debido a que la comunicación entre procesos es costosa, cualquier estrategia eficiente de load balancing debe intentar minimizar el número de intercambios de este tipo.

El código WALICXE3D logra una distribución eficiente de bloques recorriendo una *curva de Hilbert*. Esta curva pertenece a una familia de curvas matemáticas (llamadas usualmente *curvas de Peano*) que pueden construirse recursivamente y que llenan completamente el espacio. Para entender esto intuitivamente, se puede imaginar una malla de puntos separados por distancias finitas y distribuidos uniformemente en el espacio. Se traza entonces una curva que visita todos los puntos de esta malla sin cruzarse a sí misma. Conforme el espaciamiento entre los puntos tiende a cero, la curva trazada tiende a una curva de Peano. En la Figura 2.14 se muestran las primeras 6 iteraciones de la construcción de la curva de Hilbert en el plano 2D. En WALICXE3D se construye la curva de Hilbert en 3D con suficientes iteraciones para que la curva visite todos los bloques en todos los niveles de refinamiento.

Las curvas de Hilbert tienen la propiedad de que preservan aproximadamente la *localidad*. Esto quiere decir que si la distancia *sobre la curva* entre dos puntos es pequeña, entonces la distancia Euclidiana entre los puntos tenderá a ser pequeña también. Esta pro-

piedad puede ser explotada para generar distribuciones de bloques en la que los bloques asignados a cada proceso tienden a estar cerca espacialmente (e.g., Ji et al. 2010). Esto permite reducir el número de intercambios de fronteras entre procesos y asegurar que la carga computacional esté distribuida de manera equitativa entre los procesos.

En la Figura 2.15 se muestra un ejemplo de la partición de un dominio computacional en la que los bloques (en todos los niveles de refinamiento) se han distribuido entre 6 procesos. Cada cubo corresponde a un bloque individual y los colores indican a cuál de los 6 procesos pertenece. Se puede constatar que la partición asigna bloques contiguos a cada proceso.

2.5. Procesamiento de Datos

La visualización y post-procesamiento de datos es una parte importante del proceso de modelado numérico, pues es necesaria para extraer información de utilidad científica de la gran cantidad de datos producida por una simulación tridimensional. WALICXE3D cuenta con la posibilidad de escribir salidas de datos (lo cual incluye las variables hidrodinámicas y la información de la estructura de la malla) en dos formatos distintos: (1) un formato binario “nativo” el cual almacena los datos de forma compacta y es necesario para reanudar la ejecución del código a partir de una salida anterior (*warm starts*); (2) formato VTK compatible con el paquete de visualización VisIt² desarrollado por el Lawrence Livermore National Laboratory. Esto permite aprovechar el amplio abanico de opciones de visualización y procesamiento de datos en 2D y 3D que ofrece este paquete.

Además de la compatibilidad con VisIt, WALICXE3D cuenta con dos utilerías propias para post-procesamiento de datos que permiten realizar tareas frecuentemente requeridas. El programa `extract` permite extraer cortes bidimensionales de los datos 3D de la simulación sobre cualquiera de los planos cartesianos, creando una malla 2D uniforme a partir del corte de la malla 3D. Esto es útil pues la cantidad de datos producidas por las simulaciones 3D es comúnmente tan grande que visualizar el dominio 3D completo se vuelve poco práctico.

Por otro lado, el programa `coldens` es un utilería para integrar y proyectar el dominio computacional sobre un plano arbitrario. Se puede emplear, por ejemplo, para crear mapas

²www.llnl.gov/visit

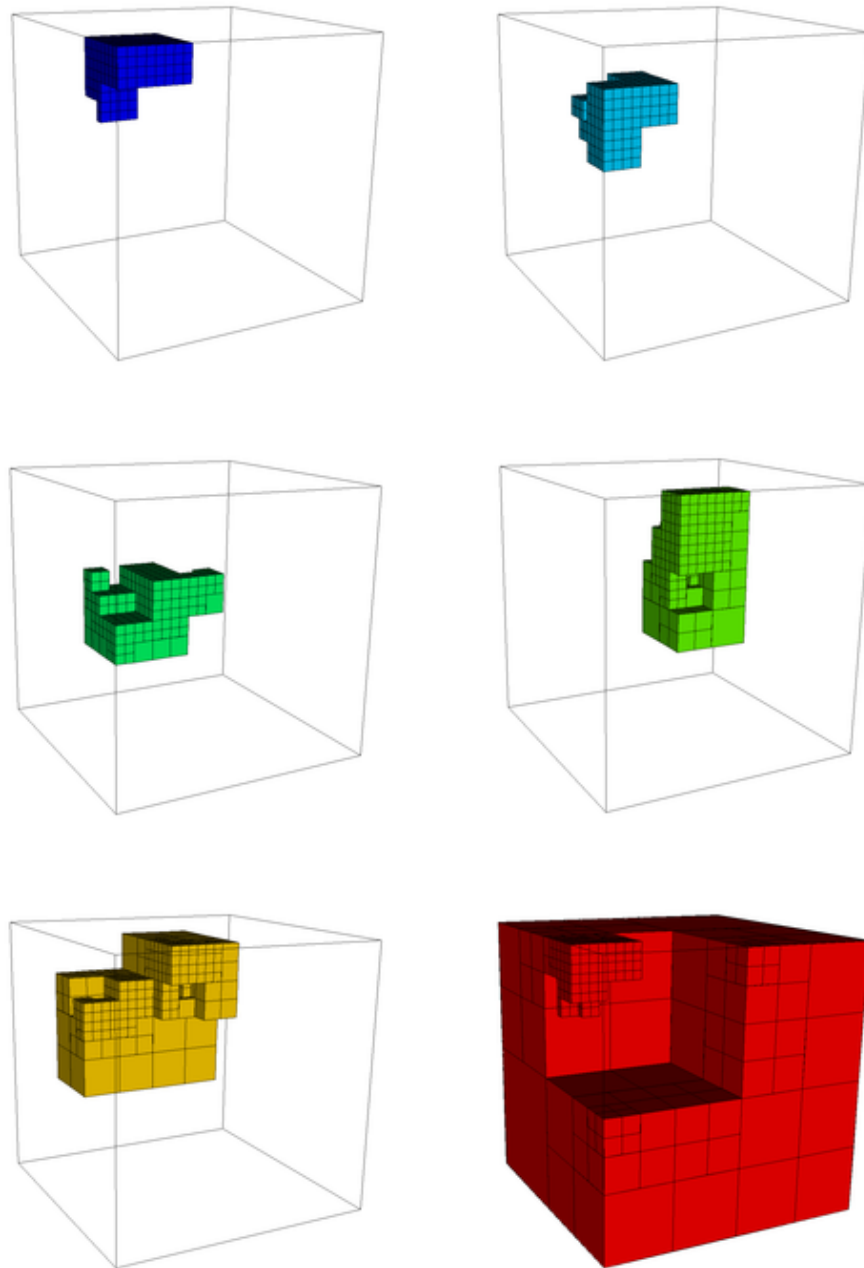


Figura 2.15: Ejemplo de la partición del dominio computacional entre 6 procesos. Cada cubo es un bloque. Todos los procesos tienen asignados aproximadamente el mismo número de bloques, y los bloques de cada proceso son contiguos espacialmente.

de densidad columnar simulada sobre el plano del cielo (de ahí su nombre). Este programa incluye subrutinas que permiten calcular emisión de rayos X térmica, así como emisión de radio sincrotrón cuando se tiene información del campo magnético en la simulación, e integrarla sobre el plano del cielo para producir mapas sintéticos que pueden comparados directamente con las observaciones. También ofrece al usuario la opción de definir una serie de rotaciones que permite escoger arbitrariamente la orientación del plano sobre el cual se proyectan los datos.

2.6. Pruebas

Aunque los algoritmos numéricos de WALIXE3D ya se han probado extensamente, fue necesario verificar que su implementación fuera correcta. Eso se realizó, por un lado, mediante tubos de choque en 1D, y por otro lado, con pruebas de remanentes de supernova en 3D.

2.6.1. Tubos de choque

Los *tubos de choque* son una prueba estándar 1D para evaluar métodos numéricos que resuelven las ecuaciones de Euler. Esta prueba numérica consiste en una condición inicial que tiene dos estados constantes separados por una discontinuidad inicial. Esto es simplemente la versión física del problema de Riemann, por lo que se conoce bien la solución analítica del problema. Como la solución del problema de Riemann involucra choques y discontinuidades en el flujo, proporciona un marco ideal para poner a prueba métodos que pretenden simular flujos con este tipo de características.

El integrador numérico de WALICXE3D está altamente modularizado, y la parte más fundamental del algoritmo calcula los flujos numéricos del problema de Riemann en cada interfase a lo largo de una sola dirección generalizada, razón por la que una prueba 1D es adecuada para asegurar su funcionamiento.

Para especificar una prueba de tubo de choque basta con dar las condiciones iniciales del fluido ($\gamma = 5/3$) a cada lado de la interfase: $\mathbf{W}_L = (\rho_L, u_L, p_L)$ y $\mathbf{W}_R = (\rho_R, u_R, p_R)$. Es usual que las variables hidrodinámicas estén especificadas en unidades adimensionales arbitrarias.

La primera prueba es el *tubo de choque de Sod*, una prueba que se ha vuelto clásica

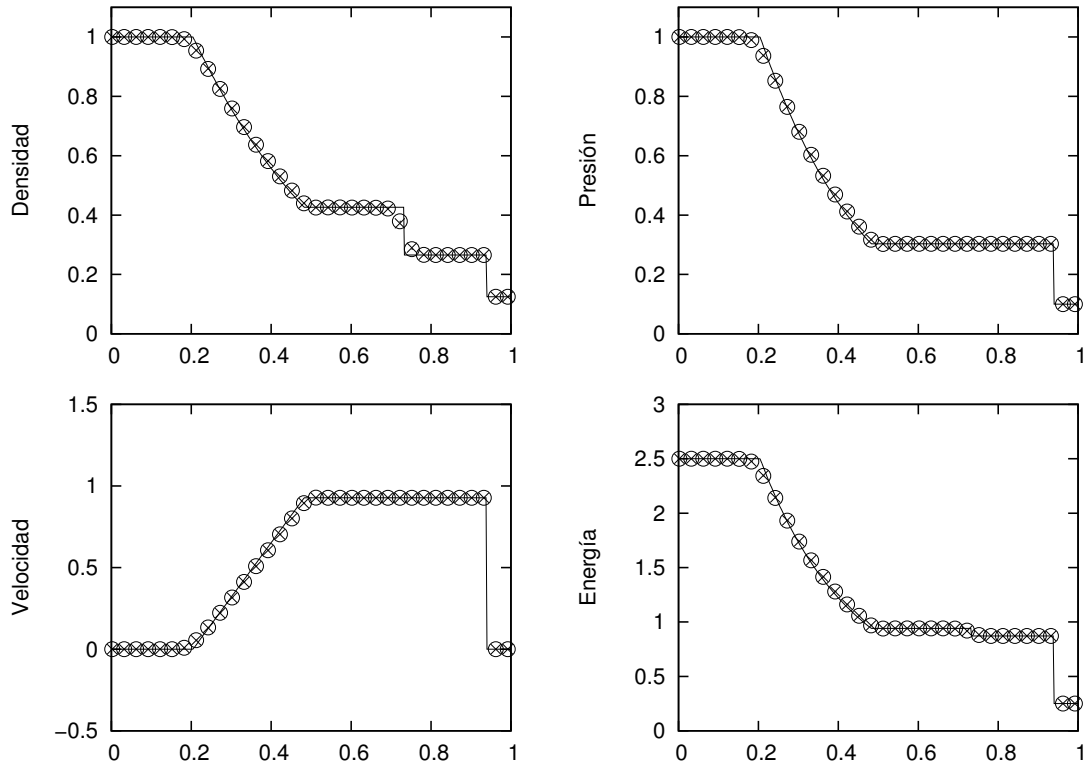


Figura 2.16: Resultados de la Prueba 1, el tubo de choque de Sod, para el tiempo $t = 0.25$. La solución analítica está indicada con la línea continua, mientras que las cruces y círculos indican la solución numérica usando el HLL y HLLC, respectivamente. La discontinuidad inicial se colocó en $x = 0.5$. Aunque se emplearon 500 puntos en la simulación, por claridad aquí no se muestran todos.

y que fue explorada extensamente por Sod (1978). El problema se define según $\mathbf{W}_L = (1.0, 0.0, 1.0)$, $\mathbf{W}_R = (0.125, 0.0, 0.1)$. Su solución es una onda de rarefacción que se mueve hacia la izquierda, un choque que se mueve a la derecha, y una discontinuidad de contacto entre ellas que se mueve a la derecha. En la Figura 2.16 se muestra el estado de la simulación numérica realizada con 500 puntos para el tiempo $t = 0.25$. Los paneles de la figura corresponden, comenzando desde el panel superior izquierdo y en sentido de las manecillas del reloj a: densidad, presión, energía y velocidad del fluido. Las cruces y círculos indican la solución numérica obtenida usando los algoritmos HLL y HLLC (por claridad, no se muestran todos los 500 puntos), respectivamente, mientras que las líneas continuas corresponden a la solución exacta.

La Prueba 2 es una prueba mucho más fuerte que el tubo de choque de Sod, por lo que

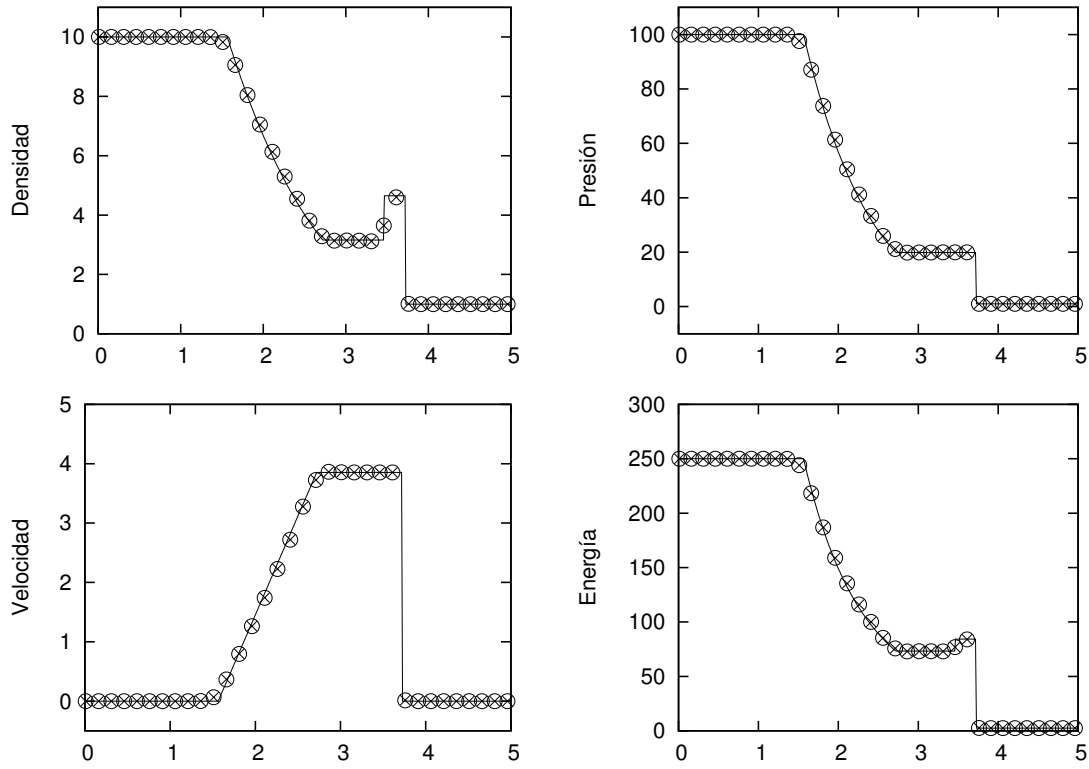


Figura 2.17: Resultados de la Prueba 2, una prueba mucho más fuerte del tubo de choque de Sod, para el tiempo $t = 0.25$.

es más demandante para el algoritmo numérico, y está dada por las condiciones iniciales siguientes: $\mathbf{W}_L = (10.0, 0.0, 100.0)$, $\mathbf{W}_R = (1.0, 0.0, 1.0)$. La estructura de la solución es la misma que en el tubo de choque de Sod, pero la zona entre la discontinuidad de contacto central y la onda de choque que se propaga hacia la derecha es angosta. En la Figura 2.17 se muestran los resultados numéricos para el tiempo $t = 0.25$, donde los símbolos indican lo mismo que en la Figura 2.16.

Las pruebas anteriores muestran que los algoritmos HLL y HLLC son excelentes para capturar choques: en todos los casos el choque fue reproducido como una región de unas pocas celdas. Las discontinuidades de contacto son resueltas con un grado de difusión numérica que es comparable con otros algoritmos (Toro 1999).

El objetivo de las siguientes dos pruebas fue mostrar la diferencia entre los algoritmos HLL y HLLC. En ambas pruebas la presión es constante inicialmente, de manera que la solución consta solamente de una discontinuidad de contacto.

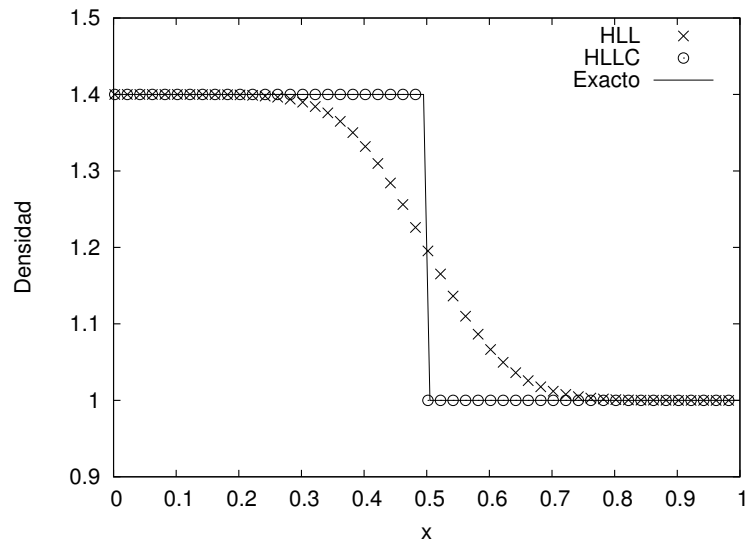


Figura 2.18: Resultados de la Prueba 3, una comparación entre los algoritmos HLL y HLLC para un tubo de choque cuya solución exacta es una discontinuidad de contacto inmóvil. El tiempo mostrado aquí es $t = 0.5$.

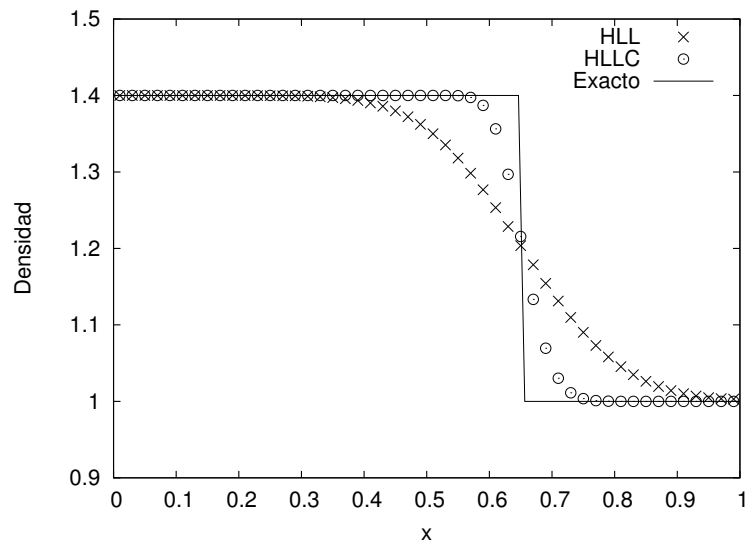


Figura 2.19: Resultados de la Prueba 4. Aquí la solución es una discontinuidad de contacto que se mueve lentamente hacia la derecha. El tiempo mostrado aquí es $t = 1.5$.

En la Prueba 3 las condiciones iniciales están dadas por $\mathbf{W}_L = (1.4, 0.0, 1.0)$ y $\mathbf{W}_R = (1.0, 0.0, 1.0)$. La solución analítica es una discontinuidad de contacto que permanece estacionaria en $x = 0.5$. En la Figura 2.18 se muestra la densidad según calculada por los algoritmos HLL (cruces) y HLLC (círculos), así como la solución exacta (línea continua). Se observa que el HLLC produce una solución indistinguible de la exacta mientras que el HLL muestra difusión numérica apreciable.

En cambio, en la Prueba 4 los estados iniciales izquierdo y derecho fueron $\mathbf{W}_L = (1.4, 0.1, 1.0)$ y $\mathbf{W}_R = (1.0, 0.1, 1.0)$, y la solución analítica es una discontinuidad de contacto que se mueve lentamente hacia la derecha. La Figura 2.19 muestra de nuevo los resultados para la densidad. Se constata que, aunque ambos algoritmos muestran un poco de difusión numérica, el HLLC resulta en una solución mucho más cercana a la exacta.

2.6.2. Pruebas en 3D

La prueba numérica tridimensional más común es una explosión puntual, pues puede compararse directamente con la solución analítica de Sedov. Empleamos WALICXE3D para simular una explosión con los parámetros típicos de una explosión de supernova. Se inyectaron 10^{51} erg de energía en (distribuida como cinética y térmica de manera equitativa) una región esférica de radio 1.0 pc centrada en el origen y de masa total $2.0 M_{\odot}$. Se dejó evolucionar el remanente por 50 kyr en una caja cuyos lados miden 25 pc y con una resolución en el nivel más fino equivalente a 256^3 en malla uniforme. En la Figura 2.20 se muestran cortes bidimensionales de la densidad sobre los planos xy , xz y yz para el tiempo $t = 5$ kyr.

En la Figura 2.21 se muestra la evolución temporal de la posición del choque. Los círculos indican el resultado de la simulación numérica adiabática mientras que la línea continua corresponde a la solución de Sedov (ec. (1.10)). Se constata que el acuerdo entre la predicción teórica y los resultados de las simulaciones tridimensionales es muy bueno. Las cruces indican los resultados de la misma simulación pero incluyendo enfriamiento radiativo. Se puede ver el despegue de la curva alrededor de $t \sim 25$ kyr, tiempo al cual el remanente ingresa a la fase radiativa.

Los tres paneles de la Figura 2.22 muestran perfiles interiores de densidad, velocidad y presión para $t = 5$ kyr (el radio del choque para ese tiempo es de 10 pc). Los círculos indican los resultados de la simulación, la línea continua indica la solución de Sedov. Las

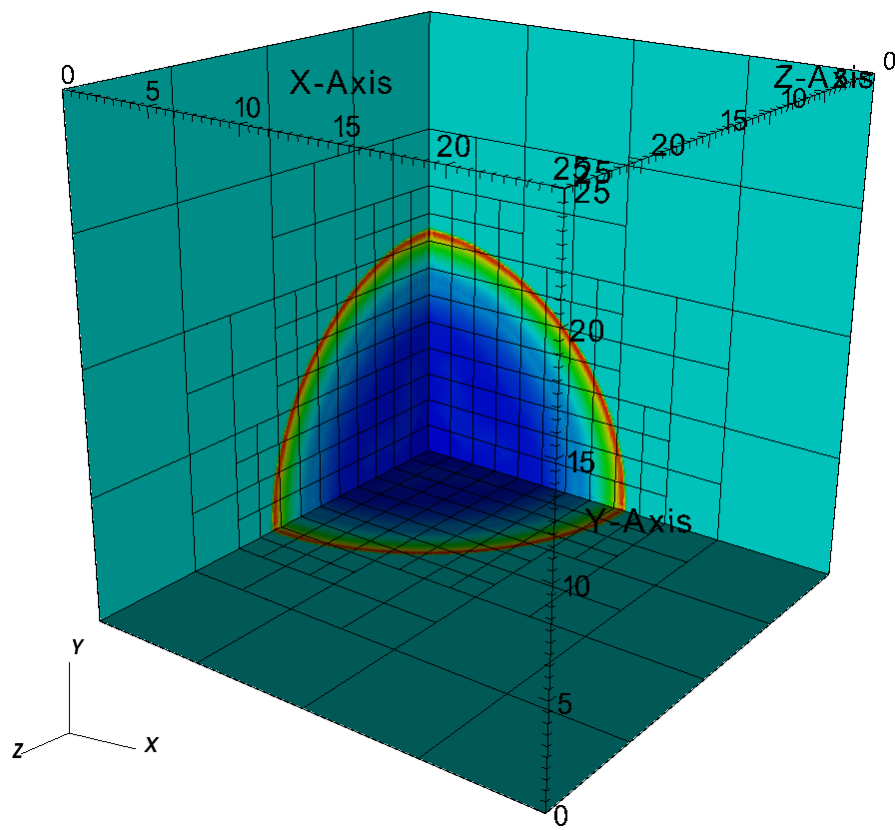


Figura 2.20: Cortes bidimensionales de la densidad para el tiempo $t = 10$ kyr. Se puede apreciar las zonas donde la malla ha sido refinada.

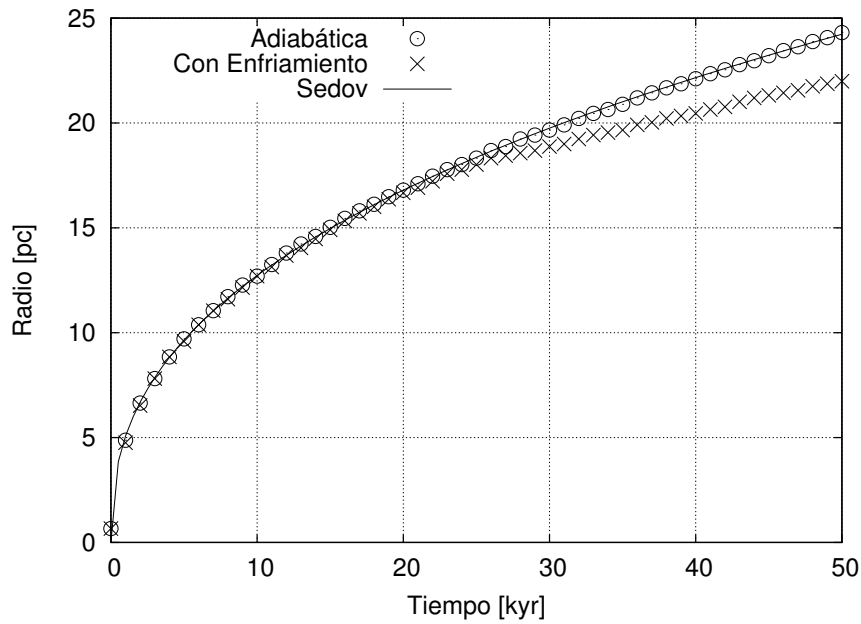


Figura 2.21: Evolución temporal de la posición del choque. Se muestran los resultados de la simulación numérica adiabática (cruces) e incluyendo enfriamiento radiativo (cruces), así como la solución de Sedov (línea continua).

variables han sido normalizadas a sus valores en el choque en la solución analítica. El eje x indica la posición en pc. Se comprueba que la solución numérica coincide con la analítica de forma razonable en el primer parsec detrás del choque. Más adentro, la solución numérica muestra estructura adicional que la solución autosimilar no contiene. Se puede ver que el interior ha sido modificado por el paso del choque de reversa a través del material. El choque de reversa es claramente visible alrededor de $r \sim 5$ pc.

Estos resultados tridimensionales muestran una muy buena concordancia entre WALICXE3D y las soluciones analíticas esperadas. Junto con las pruebas 1D, validan el código como una herramienta astrofísica computacional que puede ser empleada para modelar una variedad de flujos astrofísicos. En los siguientes capítulos de la tesis describiremos dos aplicaciones de este nuevo código para el modelado 3D de remanentes de supernova que presentan asimetrías.

2.6.3. Impacto de la Paralelización y de la Malla AMR

Resulta también interesante estudiar el efecto que tienen tanto la malla adaptiva como la paralelización sobre el rendimiento del código. La motivación principal de emplear

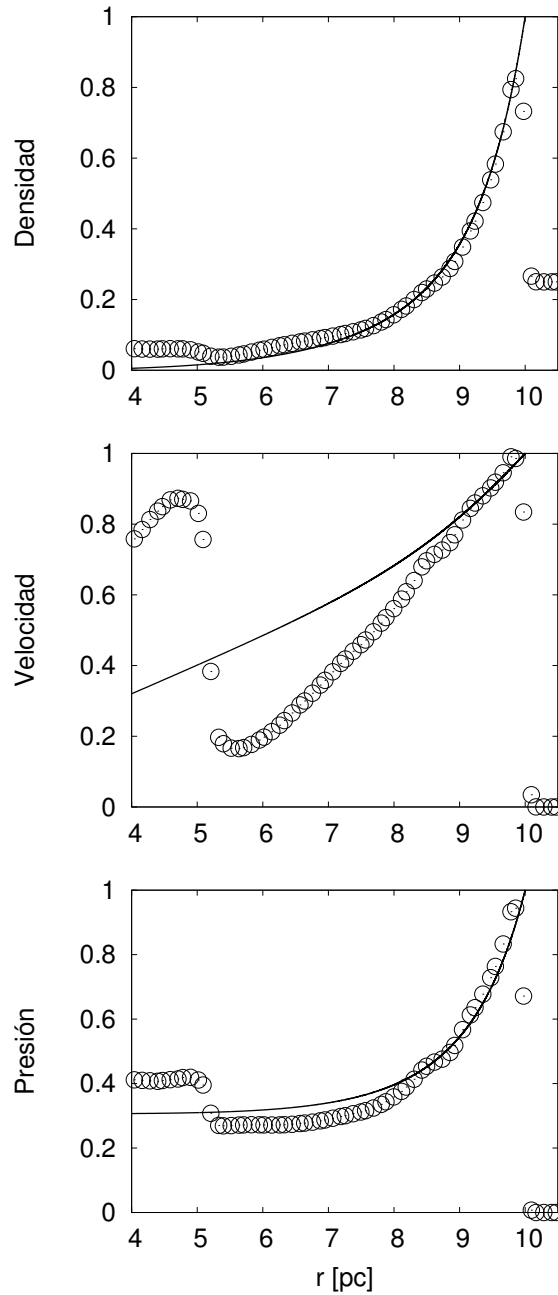


Figura 2.22: Los círculos muestran los perfiles de densidad (arriba), velocidad (centro) y presión (abajo) detrás del choque principal para el tiempo $t = 5$ kyr, mientras que la línea continua representa la solución de Sedov. Las variables han sido normalizadas a sus valores en el choque en la solución de Sedov. El eje horizontal indica la posición en pc. Nótese que la solución autosimilar sólo vale en la zona detrás del choque principal ($r \gtrsim 9$ pc); más adentro, la estructura está alterada por el paso del choque de reversa, el cual puede verse claramente en $r \sim 5$ pc.

estas técnicas es reducir, muchas veces de forma drástica, el tiempo de cómputo requerido para realizar la integración numérica. Esto permite resolver problemas más complicados o grandes (por ejemplo, con una mayor resolución espacial) de lo que se podría en un código de malla fija que no es paralelo. Para este fin, se realizaron pruebas de rendimiento con el fin de medir el impacto que tiene variar los parámetros principales de la malla y de la paralelización.

En el primer experimento, se simuló la evolución de una explosión adiabática variando el número de procesos paralelos empleados por el código. La condición inicial común a todas las corridas es una explosión con 10^{51} erg de energía (divididos equitativamente entre energía cinética y térmica) impuestos en una región esférica de 0.05 pc de radio. La caja computacional se extiende 1 pc en cada dirección cartesiana y se emplearon 5 niveles de refinamiento, lo que equivale a una resolución en el nivel más fino de 256^2 . El medio ambiente es uniforme y de densidad 1.0 cm^{-3} (con $\mu = 1.3$), y el gas tiene $\gamma = 5/3$. Se siguió la evolución por 5 kyr y se midió el tiempo de ejecución para distintas corridas empleando $n_p = 1, 2, 4, 8, 16, 32$ y 64 procesos paralelos. Nótese que la evolución del fluido es la misma en todas las corridas, pues los detalles de la solución numérica son los mismos (y esto se comprobó comparando el estado final de la simulación en cada caso). La única diferencia entre las corridas es el número de procesos entre los que se distribuye la carga computacional.

En la Figura 2.23 se muestra el rendimiento paralelo (*parallel speedup*) como función del número de procesos para esta prueba. Este rendimiento se define como $S_p \equiv T_1/T_p$, donde T_1 es el tiempo de ejecución empleando un sólo proceso y T_p es el tiempo de ejecución empleando p procesos. La línea recta discontinua es el caso ideal, en el que se obtiene un incremento *lineal* en el rendimiento, $S_p = p$ (es decir, una corrida en p procesos se ejecuta p veces más rápido que en uno solo). Con el fin de hacer más claros los resultados del experimento, hemos separado el incremento de rendimiento en dos componentes: el asociado al tiempo de cálculo del código (lo cual incluye la integración numérica en sí así como los aspectos de manejo de la malla y de paralelización) y el asociado a la escritura de datos. Incluimos estos dos aspectos pues el comportamiento del rendimiento en cada uno sigue patrones distintos e interesantes.

De la curva correspondiente a la parte de cálculo (cuadros y línea rojos) se ve que el rendimiento comienza creciendo de forma casi lineal conforme se aumenta el número

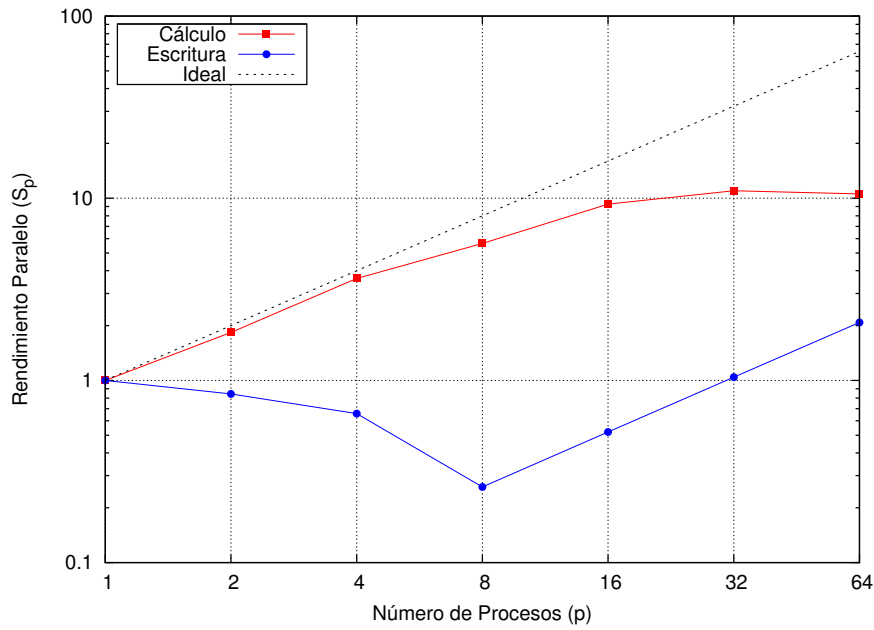


Figura 2.23: Rendimiento paralelo como función del número de procesos en una prueba para 1, 2, 4, 8, 16, 32 y 64 procesos. Las dos curvas continuas representan el rendimiento para el cálculo (cuadros rojos) y para la escritura de datos (círculos azules). La línea recta discontinua es el caso ideal, en el que el rendimiento es lineal.

de procesos hasta $p = 4$, en donde $S_4 = 3.6$. Para números más grandes de procesos, las ganancias son cada vez más pequeñas, y de hecho para el caso final en que $p = 64$ el código ya no se ejecuta más rápido aunque se incremente el número de procesos. Por un lado, de la *Ley de Amdahl* (Amdahl 1967) se espera que el rendimiento paralelo de cualquier algoritmo esté limitado por el tiempo de ejecución de las partes no-paralelas del mismo, de manera que el rendimiento lineal no puede continuar indefinidamente: conforme $p \rightarrow \infty$, $T_p \rightarrow \alpha T_1$, donde α representa la fracción del algoritmo que es estrictamente no-paralela, y entonces el rendimiento tiende a una cota máxima de $1/\alpha$.

Sin embargo, si el comportamiento que se observa se debiera a la Ley de Amdahl, esta prueba implicaría que $\sim 10\%$ del código es no-paralelizable, lo cual es un valor que no parece razonable. Para entender entonces la causa, conviene analizar de manera detallada los factores que determinan el tiempo de ejecución de una iteración del algoritmo.

En la Figura 2.24 mostramos el desglose del tiempo de ejecución para una sola iteración del código cerca del final de la simulación (cuando la carga computacional es máxima). Se compara la misma iteración para todas las corridas (y por claridad no se muestran aquí las

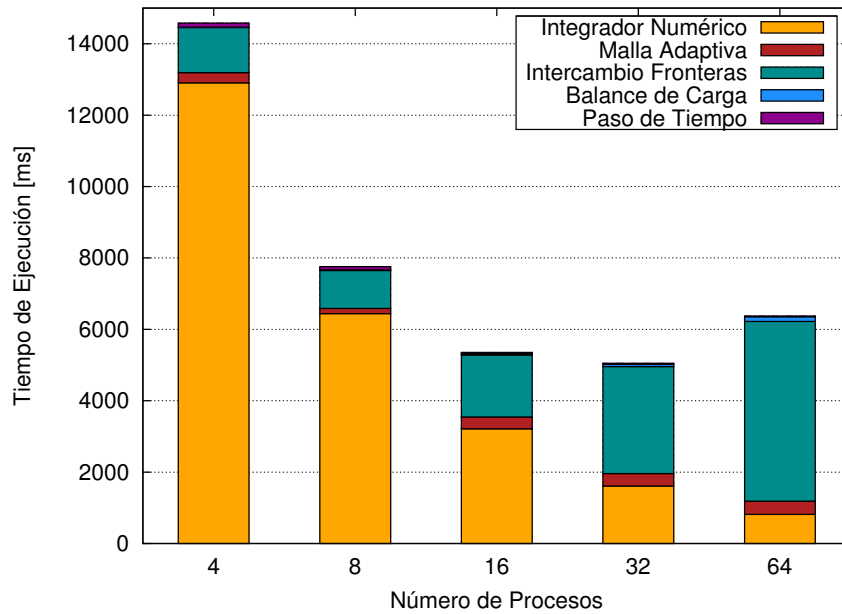


Figura 2.24: Desglose de los tiempos de ejecución de distintas partes del código para una iteración en las corridas con 4, 16, 32 y 64 procesos.

corridas con 1 y 2 procesos pues sus tiempos totales son bastante más grande y exhiben un rendimiento paralelo cercano al ideal). Sobresalen inmediatamente dos contribuciones principales al tiempo de ejecución: el tiempo empleado por el integrador numérico (naranja) y el necesario para realizar el intercambio de fronteras entre los bloques (turquesa). La siguiente contribución más grande, aunque resulta bastante más pequeña que la suma de las anteriores, es la de refinar/desrefinar la malla adaptiva (rojo), mientras que el balance de la carga entre los procesos (azul) y el avanzar las variables al final del paso de tiempo (morado) consumen comparativamente muy poco tiempo.

Se observa claramente que el tiempo que toma la integración numérica decrece casi linealmente con el número de procesos. Esto es de esperarse, pues la cantidad de operaciones necesarias para la integración depende directamente del número de celdas, y por lo tanto del número de bloques que existen en la simulación. El número de bloques es el mismo para todas las corridas, de manera que esperaríamos que las corridas con más procesos completen la integración en menos tiempo.

En cambio, el tiempo necesario para el intercambio de fronteras entre bloques sigue un comportamiento casi opuesto: de 4 a 8 procesos, el tiempo total requerido por esta

parte del código decrece (aunque no linealmente), pero al aumentar el número de procesos más allá de 8, este tiempo comienza a crecer y para la prueba con 64 procesos de hecho se vuelve la contribución dominante. Esto puede entenderse al considerar que el paso de fronteras entre bloques en distintos procesos debe hacerse mediante mensajes de MPI, lo cual es usualmente considerablemente más lento que la lectura y copia de información directamente en memoria RAM. Entre más procesos exista, habrá necesariamente más operaciones de comunicación inter-proceso, las cuales resultan costosas.

Además, estas pruebas en particular fueron realizadas en un *cluster* con nodos de cómputo que cuentan cada uno con 8 *cores* físicos de procesamiento. Esto explica por qué el tiempo requerido por el intercambio de fronteras decrece al pasar de 4 a 8 procesos, pero aumenta más allá de 8: esta operación se vuelve aún más costosa cuando la comunicación debe ocurrir entre procesos que se encuentran en distintos nodos de cómputo, pues en ese caso los datos deben viajar a través de la red de fibra óptica que conecta los nodos. En este caso, esto ocurre cuando se emplean más de 8 procesos, pues en ese caso la simulación debe utilizar más de un nodo de procesamiento.

La conclusión que se puede obtener de este experimento es que el tiempo de ejecución escala de forma aceptable para números no muy grandes de procesos, y que existe un número de procesos a partir del cual ya no se obtienen beneficios. Se hace notar que el número de procesos al cual ocurre esto en general dependerá de la complejidad y detalles del problema específico que se está resolviendo. Aún así, queda claro que si se quiere que el código escale de manera práctica a cientos o miles de procesos, la parte del código que deberá optimizarse es el intercambio de fronteras entre bloques de distintos procesos.

El otro aspecto de la Figura 2.23 que vale la pena comentar es el rendimiento paralelo del tiempo de escritura de datos (círculos y línea azules); este es el tiempo total empleado para escribir las salidas de datos (el estado de las variables hidrodinámicas) a disco. En estas pruebas esto ocurre en intervalos de 100 años, lo que resulta en un total de 50 salidas de datos por simulación, y las últimas salidas alcanzan un tamaño de unos 500 MB. Observamos en la figura que para 2, 4 y 8 procesos, de hecho se obtienen rendimientos decrecientes y menores que 1, lo que quiere decir que el tiempo empleado en la escritura de datos *crece* conforme se aumenta el número de procesos. Sin embargo, a partir de 8 y hasta 64 procesos se obtiene no sólo que ahora el tiempo *decrece*, sino que lo hace de forma prácticamente ideal: doblar el número de procesos reduce a la mitad el tiempo total

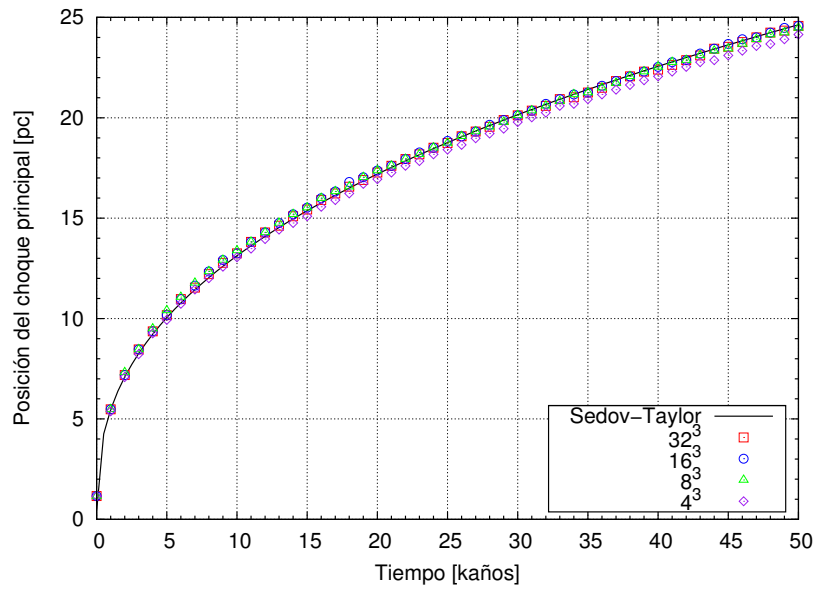


Figura 2.25: Evolución temporal de la posición del choque principal variando el tamaño de los bloques pero dejando fija la resolución en el nivel más fino. La curva continua indica la solución de Sedov-Taylor para esta explosión.

de escritura.

Para entender esto también es necesario considerar los detalles de la arquitectura de *hardware* del equipo de cómputo en que se ejecutaron las simulaciones. Cuando varios procesos que se ejecutan en el mismo nodo intentan escribir datos al mismo tiempo, deben competir por el uso del único canal de transmisión de datos desde el nodo hasta los discos de almacenamiento. Resulta que entre más procesos concurrentes haya en un mismo nodo, más grande es la demanda al controlador de entrada/salida y se requiere más tiempo para atender a todos los procesos. Pero cuando se aumenta el número de *nodos*, como ocurre en cada punto de la gráfica a partir de 8 procesos, se aumenta también el número de canales independientes de entrada/salida, por lo que la escritura se vuelve proporcionalmente más rápida.

En el segundo experimento se analizó el impacto que tiene la malla AMR sobre el tiempo de ejecución y sobre los resultados de la simulación. Para lograr esto, se corrieron una serie de pruebas en las que se varió el *número de celdas por bloque*, dejando fija la resolución máxima de la malla, lo cual es equivalente a cambiar el número de niveles de refinamiento. El efecto que tiene esto es cambiar la manera en que el código discretiza el

Corrida	4^3	8^3	16^3	32^3	Sedov
R_s [pc]	24.1	24.5	24.6	24.6	24.7
t/t_{4^3}	1.0	0.46	0.71	1.48	-
bloques	5636	1352	302	64	-
celdas [miles]	361	692	1,237	9,896	-

Tabla 2.2: Radios finales del choque principal (R_s), tiempos de ejecución (t ; normalizados al de la corrida de 4^3) y número total aproximado de celdas en el estado final de la simulación (dado en miles de celdas) para las pruebas variando el tamaño de los bloques.

dominio computacional conforme evoluciona la simulación.

En estas pruebas se simuló una explosión con los mismos parámetros físicos que en las pruebas anteriores, excepto que esta vez se siguió la evolución por 50 kyr en una caja de 25 pc de lado. Las simulaciones son adiabáticas, tienen una resolución efectiva de 128^3 y se ejecutaron empleando 12 procesos. La explosión ocurre en una esquina del dominio computacional, por lo que sólo se simula un octante del fluido imponiendo condiciones de frontera reflectivas en tres de las caras.

Se realizaron cuatro corridas, empleando tamaños de bloques de 4^3 , 8^3 , 16^3 y 32^3 celdas, lo que corresponde a 6, 5, 4 y 3 niveles de refinamiento, respectivamente. Nótese que en la corrida de 32^3 el código refina prácticamente todo el dominio computacional, por lo que esta simulación se aproxima a una con malla fija uniforme. En la Figura 2.25 se muestran las curvas de evolución de la posición del choque principal como función del tiempo para estas cuatro corridas. La línea continua es la solución analítica de Sedov-Taylor para una explosión con esos parámetros. En la primera fila de la Tabla 2.2 se comparan los radios finales del choque principal para cada corrida y la solución de Sedov. Se observa que en general los resultados son muy parecidos entre sí y que se ajustan adecuadamente a la solución analítica, siendo la corrida con bloques de 4^3 celdas la única que queda ligeramente por debajo.

Al comparar los tiempos de ejecución de las corridas (ver la segunda fila de la Tabla 2.2) vemos que a partir de 8^3 celdas por bloque las corridas son progresivamente más lentas. Ignorando de momento la corrida de 4^3 , el efecto de la malla AMR es claro: entre más pequeños sean los bloques, la discretización del dominio computacional es más eficiente, pues la malla puede ajustarse más estrechamente a las zonas de interés hidrodinámico. Esto se muestra en la Figura 2.26, en la que hemos graficado la estructura de la malla final para las cuatro corridas. Esto reduce el número total de celdas que deben integrarse

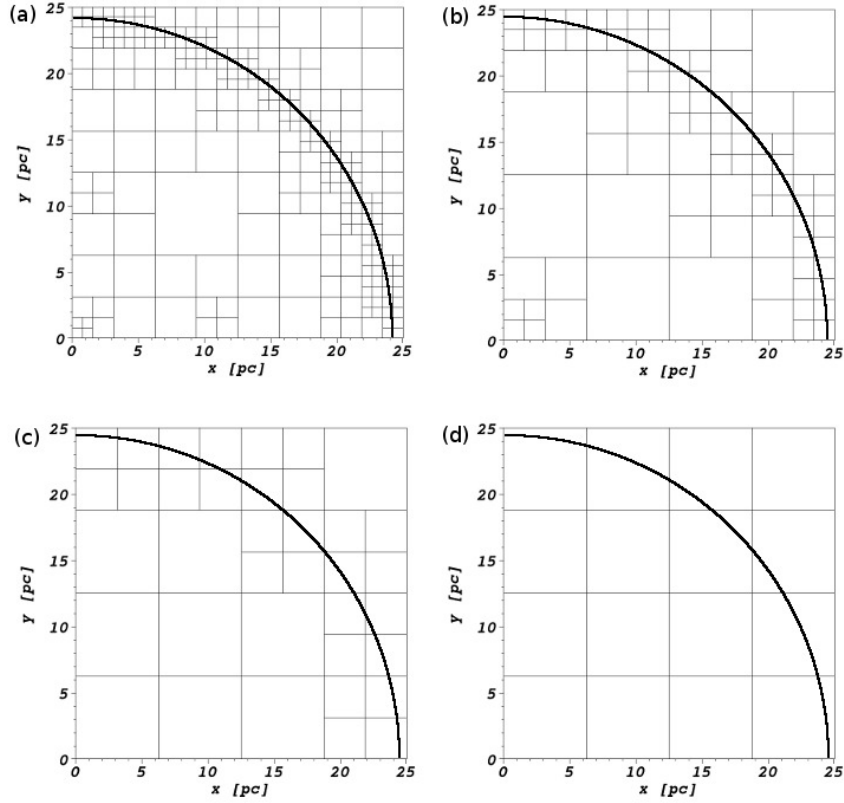


Figura 2.26: Comparación del estado final de las mallas para las pruebas con (a) 4^3 , (b) 8^3 , (c) 16^3 y (d) 32^3 celdas por bloque. La línea gruesa indica la posición aproximada del choque principal para cada caso.

en cada paso de tiempo, como puede constatarse en la tercera fila de la Tabla 2.2, en la que se dan los números aproximados de celdas en el estado final de la simulación. Es por ello que conforme las pruebas pasan de 8^3 a 32^3 los tiempos totales de ejecución para el mismo problema aumentan.

El caso con 4^3 celdas por bloque, sin embargo, indica otro hecho importante: entre más pequeños sean los bloques, mayor es el número total de bloques (como se comprueba en la última fila de la Tabla 2.2), por lo que los costos adicionales debidos al intercambio de fronteras se pueden volver importantes y reducir el beneficio de la malla AMR (aún así, en nuestro experimento la corrida de 32^3 , la cual prácticamente es de malla uniforme, sigue siendo la más lenta de las 4 por un buen margen). Se debe buscar en general, por lo tanto, un equilibrio entre estos dos factores. En la práctica, hemos encontrado que un número de celdas por bloques de 16^3 parece dar buenos resultados en general.

Bibliografía

- Amdahl, Gene M. 1967, AFIPS Conference Proceedings (30), 483
- Arnaud, M., & Raymond, J. 1992, ApJ, 398, 394
- Berger, M. J.; Colella, P. 1989, J. Comput. Phys., 82, 64
- Cocchi, J-P, Saurel, R. 1997, JCP, 137, 265
- Courant, R., Friedrichs, K., Lewy, H. 1928, Mathematische Annalen 100 1:3274
- Dalgarno, A., & McCray, R. A. 1972, ARAA, 10, 375
- Dere, K. P., Landi, E., Mason, H. E., Monsignori Fossi, B. C., & Young, P. R. 1997, A&AS, 125, 149
- Esquivel, A., Raga, A. C., Cantó, J., et al. 2010, ApJ, 725, 1466
- Fryxell, B., Olson, K., Ricker, P., et al. 2000, ApJS, 131, 273
- Giacomazzo, B. & Rezzolla, L. 2006, Journal of Fluid Mechanics, 562, 223
- Gingold, R. A., & Monaghan, J. J. 1977, MNRAS, 181, 375
- Godunov, Sergei K. 1959, Math. Sbornik, 47, 271-306
- Harten, A., Lax, P. D., van Leer, B. 1983, SIAM Rev., 25, 357
- Hua Ji, Fue-Sang Lien & Eugene Yee. 2010 JCP, 229, 23:8981
- Landi, E., Del Zanna, G., Young, P. R., Dere, K. P., Mason, H. E., & Landini, M. 2006, ApJS, 162, 261
- Lucy, L. B. 1977, AJ, 82, 1013

-
- Maron, J. L., & Howes, G. G. 2003, *ApJ*, 595, 564
- Mazzotta, P., Mazzitelli, G., Colafrancesco, S., & Vittorio, N. 1998, *A&AS*, 133, 403
- O'Shea, B. W. and Bryan, G. and Bordner, J. and Norman, M. L. and Abel, T. and Harkness, R. and Kritsuk, A. 2004, "Adaptive Mesh Refinement - Theory and Applications", Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering
- Pons, J.A., Martí, J.M. & Muller, E. 2000, *JFM*, 422, 125
- Raga, A. C., Navarro-González, R., & Villagrán-Muniz, M. 2000, *RevMxAA*, 36, 67
- Roe, P.L. 1981, *Lecture Notes in Physics*, 141, 354
- Sod, G.A. 1978. *J. Comput. Phys.* 27: 131.
- Springel, V. 2005, *MNRAS*, 364, 1105
- Sutherland, R. S., & Dopita, M. A. 1993, *ApJS*, 88, 253
- Tasker, E. J., Brunino, R., Mitchell, N. L., et al. 2008, *MNRAS*, 390, 1267
- Teyssier, R. 2002, *A&A*, 385, 337
- Toro, E. F., Spruces, M., Speares, W. 1994, *Shock Waves*, 4, 25
- Toro, E. F. 1999. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Pratical Introduction*. Springer, UK.
- Toro, E.F. & Titarev, V.A. 2002, *Proc R. Soc. Lond A*, 458, 271

Capítulo 3

A blowout numerical model for the supernova remnant G352.7-0.1

J. C. Toledo-Roy, P. F. Velázquez, A. Esquivel and E. Giacani

Resumen

Presentamos simulaciones hidrodinámicas en 3D del remanente de supernova Galáctico G352.7-0.1. Este remanente es peculiar pues en las observaciones en radio presenta una estructura interna de tipo cáscara y de un arco exterior incompleto. En nuestro modelo, la explosión de supernova que dio origen al remanente ocurre al interior pero cerca del borde de una nube esférica cuya densidad es mayor que la del medio interestelar circundante. Cuando el remanente alcanza el borde de la nube, el material se desborda hacia la región de alrededor. Se ha empleado el resultado de simulaciones hidrodinámicas para calcular mapas sintéticos de emisión sincrotrón, así como mapas sintéticos de rayos X. Encontramos que, para algunas combinaciones del mecanismo de aceleración de partículas y de la orientación del remanente con respecto a la línea de visión, la morfología peculiar de G352.7-0.1 y los tamaños relativos de las principales características observadas son reproducidos en nuestros mapas de radio. Además, los mapas de rayos X sintéticos reproducen el aumento central de las observaciones. El presente estudio fue publicado como Toledo-Roy et al. (2013).

3.1. Introduction

Most supernova remnants (SNRs) exhibit a ring-like, limb-brightened morphology in radio frequencies. The spectral index α (defined by $S \propto \nu^{-\alpha}$) of the radio emission is typically in the range 0.5-0.6, indicating that the radio emission is non-thermal, having a synchrotron origin. Such *shell-like* appearance is the traditional picture of an SNR.

However, not all shell-type radio remnants consist of a single well-defined and clearly recognizable ring-like structure. Observations at increasingly higher angular resolution and sensitivity have shown that SNRs exhibit a wide variety of complex morphologies: breakouts, barrel-shaped structures, multiple or incomplete shells, etc. Some examples of this variety include SN 1006 (Kesteven & Caswell, 1987), G296.5+10.0 (Giacani et al., 2000), 3C400.2 (Dubner et al., 1994) and Kes 79 (Giacani et al., 2009). Such a diversity reflects not only variations in the properties of the progenitor star and of the explosion itself, but also of the physical conditions of the surrounding interstellar medium (ISM).

The Galactic SNR G352.7-0.1 is an example of a radio SNR with multiple ring structures. Initially identified as an SNR by Clark (1973), its apparent double-ring structure was first noted by Caswell et al. (1983), and was later confirmed by Dubner et al. (1993) by means of higher angular resolution VLA imaging at 1465 MHz. The most detailed image of G352.7-0.1 available up to the present is that obtained from VLA data at 5 GHz by Giacani et al. (2009) and shown in Fig. 3.1 as the green channel. As can be seen from this figure, the remnant can be described as an almost complete ring-like structure and a distinct arc-like structure. The smaller ring structure, located to the north-east, is nearly complete and somewhat elliptical, with apparent dimensions of about 4.6×3.5 arcmin². On the other hand, the larger structure to the south-west appears as an arc which subtends an angle of roughly 90° and is located at a distance of about 3.4 arcmin from the apparent centre of the first structure.

The distance to G352.7-0.1 has been estimated by Giacani et al. (2009) through absorption techniques using the HI profiles extracted from the Southern Galactic Plane Survey and applying the Galactic circular rotation model of Fich et al. (1989). They find that the true value probably lies between ~ 6.8 and ~ 8.4 kpc, and conclude that a value of 7.5 ± 0.5 kpc is an adequate estimate of the distance to this remnant. G352.7-0.1 is considered to be a middle-age remnant, with an age, which was estimated from the properties of the

X-ray emitting plasma observed by *XMM-Newton*, of 4700 yr.

From the morphology and spectral properties of G352.7-0.1, Giacani et al. (2009) classify it as belonging to the *mixed-morphology* group due to the combination of the shell-like radio appearance and centre-filled X-ray morphology, which was made evident by the high-resolution observations of *XMM-Newton* (shown as the red channel in Fig. 3.1). However, the double-ring structure, and notably the south-west arc, has not yet been fully explained. Giacani et al. (2009) attribute this peculiar morphology to a barrel-shaped structure in the circumstellar medium resulting from an earlier biconic flow expelled from the progenitor (see Manchester 1987 for a more complete discussion of this model). This argument is especially compelling when a pulsar is detected at or near the deduced vertex of the biconic flow. However, no pulsar is known to exist in the interior of G352.7-0.1.

An important idea that has been advanced in order to explain the bilateral nature of some SNRs is that the morphology of the synchrotron emission can depend on the relative orientation of the line of sight with respect to the magnetic field (the aspect angle). For instance, Fulbright & Reynolds (1990) showed that bilateral morphologies are produced for a range of values of the aspect angle.

One crucial aspect involved in the production of asymmetric radio emission in this model is the efficiency of the particle acceleration mechanism responsible for the synchrotron emission behind the SN shock front. The key idea is that the particle injection efficiency depends on the angle between the normal of the shock and the direction of the local magnetic field (the so-called obliquity angle). This dependence can play a determining role in shaping the overall radio morphology of the remnant, especially for bilateral remnants. However, there is still no definite consensus in the literature about which of two particle acceleration mechanisms is dominant, if any. While some studies (e.g., Orlando et al. 2007; Petruk et al. 2009; Schneider et al. 2010) have suggested that the so-called quasi-perpendicular particle injection produces better results, other theoretical and observational studies (e.g., Rothenflug et al. 2004; Bocchino et al. 2011; Petruk et al. 2011; Reynoso et al. 2013) have found that the quasi-parallel mechanism is more adequate in reproducing observed morphologies in SNRs. The bottomline is that, at this juncture, it is difficult to take one side or the other, or even to assert with certainty whether synchrotron morphology is sensitive to the obliquity angle at all. Therefore, any study that compares synthetic synchrotron emission with the observations should consider both possibilities.

Recently, models of bilateral SNRs have explored aspects that might explain additional details of the asymmetry. For instance, Orlando et al. (2007) performed 3D numerical simulations of SNR shocks propagating through a magnetized ISM, and studied two specific scenarios: in the first, the remnant expands into a density gradient in the ISM, while in the second the medium has homogeneous density, but the magnetic field strength exhibits a gradient. They found that these gradients in the properties of the ISM can produce bilateral SNRs with limbs of different brightnesses when the line of sight is tilted with respect to the direction of the magnetic field and to the gradients of density or magnetic field strength.

A similar model was applied by Schneider et al. (2010) to explain the asymmetric morphology of SN 1006 in radio continuum and the existence of a filament observed in thermal X-ray emission. In their model, an expanding SNR encounters a density discontinuity in the form of a flat cloud. They obtain synchrotron emission morphologies similar to the observations. Their results depend on the orientation of the interstellar magnetic field relative to the line joining the remnant and cloud centres.

The paper is organized as follows. In Section 4.2, we explain the blowout model we propose to explain the morphology of G352.7-0.1, with the details of the numerical simulations given in Section 4.3. Section 4.4 presents the results of our simulations and corresponding synthetic maps, and discusses their agreement with the observed morphology. Finally, in Section 4.6 we give our conclusions.

3.2. The blowout model

In our model, we propose that G352.7-0.1 is the result of an SN explosion occurring near the border of a dense spherical cloud, producing a blowout into a lower density surrounding medium. This is similar to the model suggested by Wilner et al. (1998) for the case of the remnant 3C 391. We then explore the impact of the different particle injection mechanisms (of electrons behind the shock front) on the resulting asymmetry of the synchrotron morphologies. We seek to reproduce the general morphology of the X-ray emission as well.

With these ideas in mind, we intend to recover the radio morphology of G352.7-0.1, as shown in Fig. 3.1, as follows: an SN explosion occurs a few pc from the edge of a large

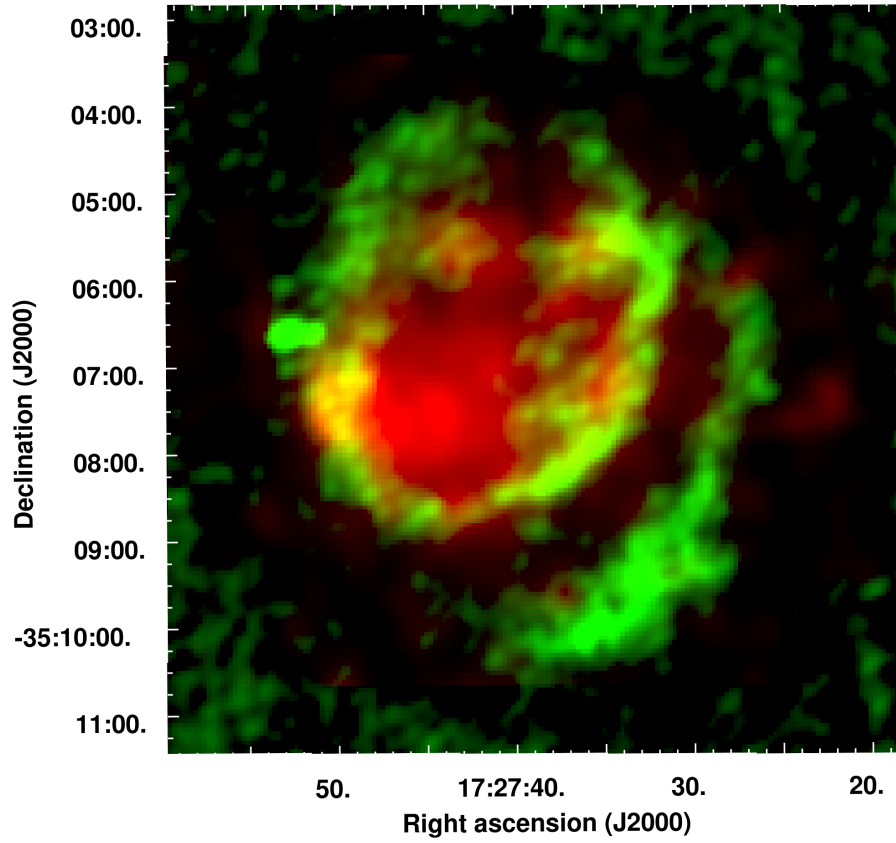


Figura 3.1: Composite image of G352.7-0.1 obtained from radio observations at 5 GHz (green channel) and X-ray data from *XMM-Newton* (red channel).

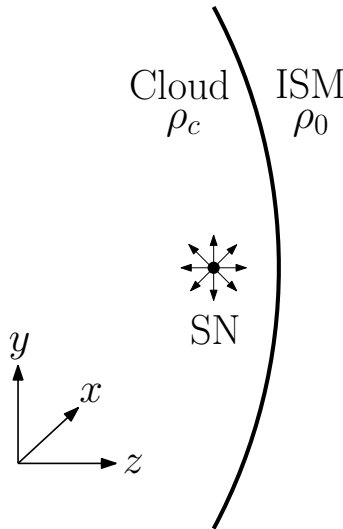


Figura 3.2: Schematic diagram of the initial conditions of the numerical model. The SN explosion and the centre of the cloud are aligned along the z -axis, while the magnetic field is either oriented along the y -axis or parallel to the z -axis.

spherical cloud, which is denser than, but in pressure equilibrium with, its surrounding medium (see Fig. 3.2). As the supernova remnant expands and reaches the cloud boundary, it blows out into the lower density ambient medium. Because of the lower density, the remnant expands faster in this medium than it does inside the cloud, and the density behind the shock does not increase as much as it does inside the cloud. As we will see, the north-eastern inner ring-like structure observed in the radio maps can be identified as resulting from the dense ring of material that forms at the cloud–ISM interface. The fact that it is noticeably elliptical in the observations can be explained by a projection effect when the structure is seen at an angle with respect to the line of sight. The second, outer arc located to the south-west is then identified as the part of the remnant that remains inside the cloud, producing an arc-like feature.

An important consideration is the choice of the direction of the ambient magnetic field (assumed initially uniform throughout the domain). Since both the cloud and the SNR are spherical, the initial orientation of the magnetic field (which is dynamically unimportant) is determined solely by the angle it forms with the line joining the centres of the SNR and the cloud (which are aligned with the z -axis; see Fig. 3.2 for reference). In order to sample a wide range of possibilities, in this work, we have studied the two extreme cases for the direction of the magnetic field: (a) the magnetic field aligned with the SNR and

cloud centres; and (b) the magnetic field perpendicular to this line. Note that full axial symmetry is present only in the first case (magnetic field parallel to the lines of centres). For any other orientation, axial symmetry is broken by the magnetic field and the simulation must be performed in 3D. Because some aspects of the flow (such as instabilities) can be sensitive to the number of dimensions in which the hydrodynamics is solved, we choose to perform all simulations in 3D so that they can be compared to one another. This has the added benefit that synthetic emission maps are free of artefacts introduced by the axial symmetry during the reconstruction process from 2D axisymmetric data to 3D data.

3.3. Numerical simulations

3.3.1. Numerical Method

The numerical simulations were obtained with the new WALICXE3D adaptive mesh refinement 3D hydrodynamical code developed by J. C. Toledo-Roy, which was tested extensively on a distributed-memory cluster. It was developed as a successor and an extension into 3D of the hydrodynamical code WALICXE (Esquivel et al., 2010), sharing the overall design philosophy and implementing revised algorithms for adaptive mesh refinement, parallelization and output visualization.

The code solves the gas dynamics equations, which can be written in conservation form as

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \nabla P = 0, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(E + P)) = -n^2 \Lambda(T), \quad (3.3)$$

where ρ is the mass density, $\mathbf{u}$ is the fluid velocity and P is the gas pressure. The total energy density E is given by

$$E \equiv \epsilon + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2, \quad (3.4)$$

where the internal energy ϵ is related to the gas pressure through the ideal gas equation of state, $\epsilon = P/(\gamma - 1)$.

To solve the gas dynamics equations, the code employs a finite-volume, conservative, second-order Godunov upwind scheme. The Riemann solver uses a second-order Runge–Kutta method for the time integration and a linear spatial reconstruction of the primitive variables at the interfaces, including a slope limiter in order to avoid spurious oscillations. The numerical fluxes are calculated using the HLLC solver, which is a contact discontinuity-capturing modification by Toro et al. (1994) of the original HLL solver (Harten et al., 1983). Because the cooling region behind the main shock cannot be resolved at typical grid resolutions, the code does not limit the integration time-step to the cooling time-scale, employing only the dynamical time-scale (through the standard Courant–Friedrichs–Lewis condition) to limit the time-step size.

For specific details of the code, such as those related to the numerical integrator, the adaptive mesh algorithm or the parallelization scheme, see the appendix of Esquivel et al. (2010), where the precursor 2D version of WALICXE3D is described.

Our intention is to compute synthetic synchrotron emission maps from the simulation data, so it is crucial to track the direction of the magnetic field behind the SN shock as the remnant sweeps through the interstellar magnetic field. In order to achieve this, we have included the magnetic field vector as an additional conserved variable and solved at each time-step the induction equation, which can be written in conservation form as:

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{B}\mathbf{v} - \mathbf{v}\mathbf{B}) = 0. \quad (3.5)$$

Note that we do not include the back reaction of the magnetic field into the dynamics of the flow [i.e., we do not solve the full magnetohydrodynamics (MHD) equations]. This is justified by the fact that the ambient magnetic field in our simulations is weak and is therefore dynamically unimportant to the evolution of the remnant (the gas pressure is much larger than the magnetic pressure).

It is important to mention that our simplified treatment of the magnetic field may have an impact on the behaviour of hydrodynamic instabilities at the contact discontinuity, which in turn can affect the mixing region in the remnant’s interior and thus change the

X-ray emission produced therein. However, one of the aims of the paper is to distinguish between a centrally peaked and a ring-like X-ray morphology, as this is one of the principal qualitative elements in the classification of SNRs. The X-ray emission is determined by a combination of the temperature and density distributions in the remnant, and while a full MHD treatment might change the inner structure of the remnant, we do not expect this to be significant enough to reverse the X-ray morphology from a ring-like to a centrally peaked one (see the discussion in Section 4.4 for further considerations on the validity of our X-ray results regarding this concern).

We simulated a gas with an adiabatic index of $\gamma = 5/3$, neglecting the effects that very efficient particle acceleration may have on the hydrodynamics. Such effects are manifested, for instance, in a smaller distance between the forward shock and the contact discontinuity (Miceli et al. 2009; Petruk et al. 2011). One way to reproduce the effect of shock modification caused by efficient particle acceleration is to lower the effective adiabatic index of the gas in the simulations to $\gamma \sim 1.1$. However, Orlando et al. (2011) found that the modified γ value mainly has an impact on the absolute values of the non-thermal emission, but not on the large-scale morphology of the remnant. Since our aim is to study the morphological features of the synthetic emission and not to calculate physical absolute values, we use a value of $\gamma = 5/3$.

The code also includes radiative cooling as a source term in the energy equation, equation (4.7), in which $\Lambda(T)$ is a parametrized cooling function and n is the gas number density. The cooling function $\Lambda(T)$ is taken as a tabulated coronal equilibrium curve (Dalgarno & McCray, 1972), which is plotted in fig. 2 of Toledo-Roy et al. (2009). This cooling function is well suited for temperatures above 10^4 K. It is turned off below this threshold, and is substituted by a $\Lambda \propto T^{1/2}$ law (corresponding to the free-free regime) above 10^8 K.

3.3.2. Initial conditions

The computational domain, spanning a box of $20 \times 20 \times 20$ pc in size, is initialized with a single root block containing 16^3 cells, which is then allowed to refine according to the code's refinement rules up to six levels of refinement, producing an equivalent resolution at the finest level of 512^3 in a fixed grid.

The simulation box is initially filled with a two-phase pre-existing medium. A spherical

cloud having a radius of 30 pc is created with its centre located outside the computational box at the virtual position $(10, 10, -18)$ pc. The cloud has a density of 10 cm^{-3} , a temperature of 10^3 K and is composed of a neutral mixture of 90 % hydrogen and 10 % helium (yielding a mean atomic mass of $\mu = 1.3$ amu). In the region outside the cloud, the uniform medium has the same chemical composition, a lower number density of 1.0 cm^{-3} and a temperature of 10^4 K. These choices of density and temperature for the two media mean that they are in pressure equilibrium.

The interstellar magnetic field is initially uniform, having a strength of $1 \mu\text{G}$ and a direction either aligned with the y -axis or aligned with the z -axis. This magnetic field is weak enough to be dynamically unimportant, as can be verified by computing the thermal-to-magnetic pressure ratio $\beta \equiv nkT/(B^2/8\pi)$, which has a value of $\beta \sim 35$ for the parameters of our simulations.

At $t = 0$, the remnant of an SN explosion is imposed at $(10, 10, 10)$ pc by injecting 2.0×10^{50} erg of thermal and kinetic energy in equal quantities into a spherical region of radius 0.5 pc, containing an ejecta mass of $2M_{\odot}$. The radius of this region was chosen to be small enough so that the explosion can be considered almost a point explosion relative to the size of the computational domain, while at the same time being large enough to ensure it is roughly spherical, given the Cartesian discretization of the grid.

In order to validate the correctness of the numerical simulation, we have calculated the radius of the remnant's main shock as a function of time, for the part of the remnant that remains within the cloud. The result is plotted in Fig. 3.3. We see that the evolution is initially consistent with the Sedov–Taylor phase ($R \propto t^{2/5}$), until $t_{\text{tr}} \approx 5 - 6$ kyr, at which point the slope changes and gradually approaches $R \propto t^{-1/4}$ as the simulation evolves. By comparing the cooling time of the gas behind the shock with the age of the remnant, assuming a simple form for the cooling function, Blondin et al. (1998) obtain that the transition time to the radiative phase should occur at about $t_{\text{tr}} \approx 2.9 \times 10^4 E_{51}^{4/17} n_0^{-9/17}$ yr. With the values in our simulation, we get $t_{\text{tr}} \approx 6$ kyr, which is in agreement with the value we find. It is interesting to note that the part of the remnant that remains within the cloud still evolves as predicted by the standard results for a spherical explosion, despite the fact that the remnant has suffered a blowout and is no longer entirely spherically symmetric. This coincides with the findings of Velázquez et al. (2001).

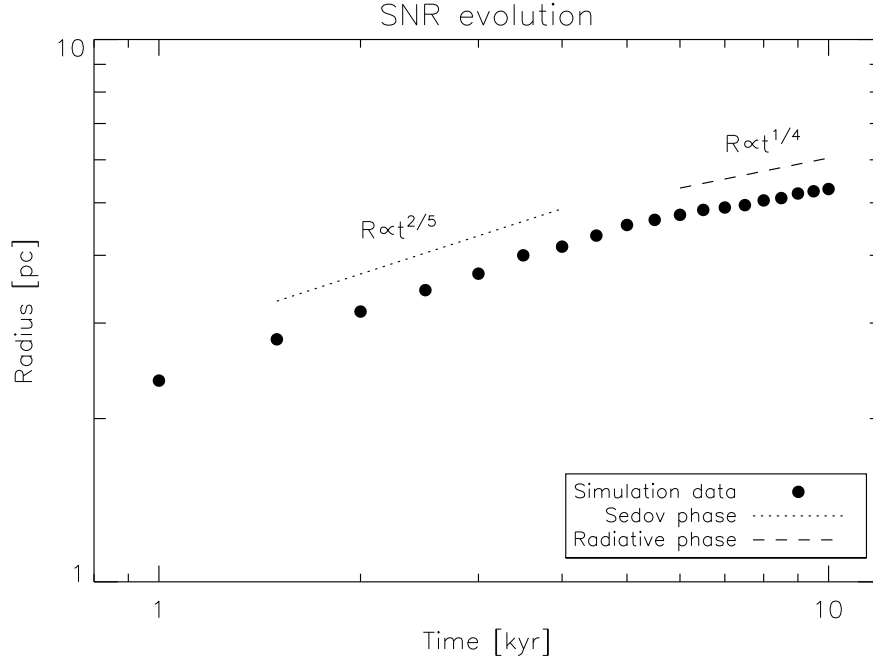


Figura 3.3: Logarithmic scale plot of the radius of the remnant’s principal shock versus time. The slopes corresponding to the Sedov–Taylor and radiative phases are shown as the dashed lines for comparison.

3.3.3. Calculation of the synchrotron emission

In order to compare the results from the numerical simulations to the observations, we calculated synthetic radio emission maps by integrating, along the line of sight, the radio emissivity given by (see Ginzburg & Syrovatskii 1965)

$$i(\nu) \propto K B_{\perp}^{\alpha+1} \nu^{-\alpha}, \quad (3.6)$$

with K being the normalization of the electron distribution behind the shock, $B_{\perp}$ the magnetic field component perpendicular to the line of sight, ν the radio frequency and α the synchrotron spectral index, which has a value of 0.6 for this SNR (Dubner et al., 1993).

The normalization factor K can be expected to vary in time to some extent as the remnant evolves and the shock decelerates. A simple way to account for this is to consider that $K \propto v_s^b$, where v_s is the shock velocity. Reynolds (1998) studied the impact of this

dependency on shock velocity for the cases $b = 0, 1$ and 2 , and found that the results are similar in all three cases. Orlando et al. (2007) confirm that the value of b does not affect the main features of the synchrotron morphology of SNRs that expand in a uniform ISM, and that it produces slight alterations in the degree of asymmetry when the gradient in ISM density is perpendicular to the line of sight. Thus, for our case, considering that the synchrotron emission is insensitive to changes in the shock velocity is a reasonable approximation, and in this work we have therefore considered that K is constant in time.

However, the efficiency of particle injection behind the SNR shock front can have a systematic dependence on the obliquity angle ϕ_{Bn} between the normal to the shock and the direction of the magnetic field (Schneider et al., 2010), and this dependence can be used to explain the asymmetric, often bilateral, radio morphology of some SNRs. In this respect, there is currently a debate in the literature as to which mechanism dominates particle acceleration. The two main lines of thought defend either the quasi-perpendicular ($\phi_{Bn} \approx 90^\circ$) or the quasi-parallel ($\phi_{Bn} \approx 0^\circ$) mechanism as being the most efficient in accelerating particles at the shock front. The quasi-parallel mechanism is associated with the classical diffusive shock acceleration (Blandford & Eichler, 1987), while the quasi-perpendicular one (also called the shock drift mechanism) can become a more efficient process because of particle acceleration by electric fields along the shock front (see e.g., Jokipii 1987).

To explore the range of possibilities regarding this matter, in this work we have calculated synchrotron emission maps for three distinct cases of the injection mechanisms: (1) isotropic (no ϕ_{Bn} dependence), (2) quasi-parallel ($\phi_{Bn} \approx 0^\circ$), and (3) quasi-perpendicular ($\phi_{Bn} \approx 90^\circ$). Following Orlando et al. (2007) and Schneider et al. (2010), we calculate synchrotron emission by using equation (3.6) and setting the normalization factor of the electron distribution K as a constant in the isotropic case, or being proportional to either $\cos^2 \phi_{Bs}$ or $\sin^2 \phi_{Bs}$, for the quasi-parallel and quasi-perpendicular cases, respectively, where ϕ_{Bs} is the angle between the shock normal and the direction of the *post-shock* magnetic field. The latter can be related to the obliquity angle ϕ_{Bn} (for strong shocks, which is the case here) through $\cos^2 \phi_{Bs} = \cos^2 \phi_{Bn} / (16 - 15 \cos^2 \phi_{Bn})$ (Orlando et al., 2007). Finally, in order to estimate the angle ϕ_{Bn} itself from the numerical results, we estimated the direction of the shock normal using either the direction of the velocity vector (at the shock) or that of the local pressure gradient.

3.3.4. Calculation of the thermal X-ray emission

In order to further compare the results of the numerical simulations with the observations, we have also calculated synthetic thermal X-ray maps by integrating the X-ray emission coefficient $j_\nu(n, T)$. The coefficient was calculated (in the low-density regime) as $j_\nu(n, T) = n_e^2 \xi(T)$, where n_e and T are the electronic density (taken to be $n_e \approx n$) and temperature obtained from our numerical simulations, while $\xi(T)$ is a function that changes smoothly with temperature. The function $\xi(T)$ was computed for the range 0.15–8 keV and standard solar metallicity using the CHIANTI atomic data base and its associated IDL software (Dere et al., 1997; Landi et al., 2006).

3.4. Results

The panels of Fig. 3.4 show an y–z cut of the number density along $x = 10$ pc for four different evolution times. The remnant’s main shock collides with the edge of the cloud shortly after 1 kyr. Because the surrounding medium is of lower density, as the main shock blows out of the cloud it accelerates, and the blownout structure rapidly increases in size. By $t = 5500$ kyr, the remnant has been considerably blown-out, resulting in a structure that is 5–6 pc in size (see Fig. 3.4d). As can be seen from the figure, the post-shock gas density is higher when the shock expands within the cloud than when it expands into the surrounding medium. As we will see, the expanding ring of dense shocked gas produced on the surface of the spherical cloud is key in producing a ring-like radio feature.

In Fig. 3.5, we show a sample of synthetic synchrotron maps projected into the plane of the sky for the snapshot at $t = 5500$ yr, which is consistent with the approximate age of the remnant within uncertainty factors. The maps are calculated with different combinations of (i) the particle acceleration mechanism used to compute the emission, indicated by the labels ISO (isotropic, no dependence), PAR (quasi-parallel) or PER (quasi-perpendicular); (ii) the orientation of the magnetic field before the line-of-sight rotation, shown as an arrow on the leftmost column; and (iii) the orientation of the line of sight used for the projection, measured as the angle between the line of sight and the z -axis of the simulation and indicated by the number in degrees in the upper right-hand corner.

The panels in the upper and lower rows of Fig. 3.5 correspond to the case where the ambient magnetic field is perpendicular to the line joining the centres of the cloud and the

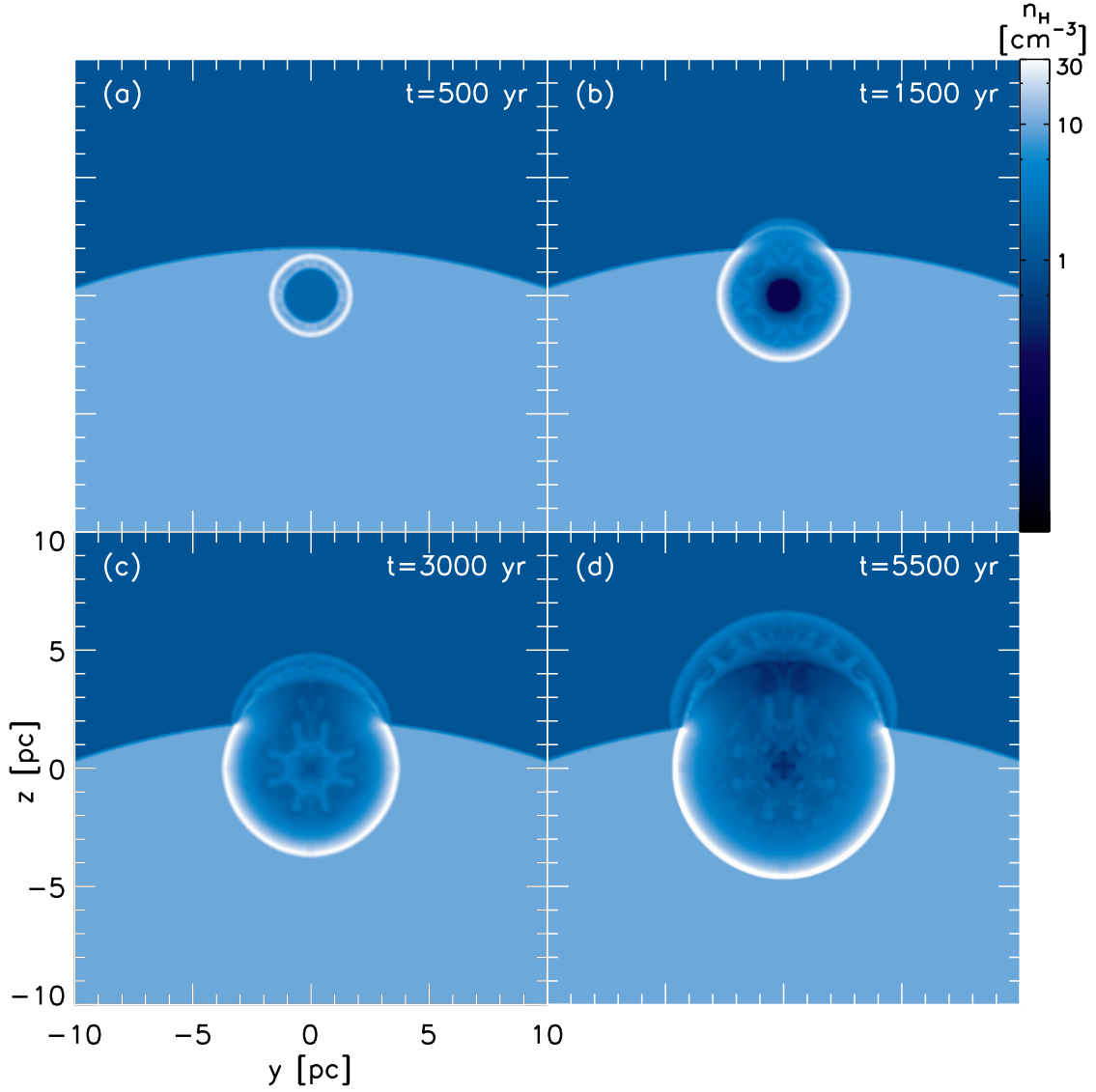


Figure 3.4: Evolution of the number density (given in cm^{-3}) from the hydrodynamical simulation (cuts in the y - z plane along $x = 10$ pc) corresponding to time snapshots at (a) 1000, (b) 2000, (c) 3500 and (d) 5500 yr. The colour scale and physical sizes of the boxes are the same in all panels.

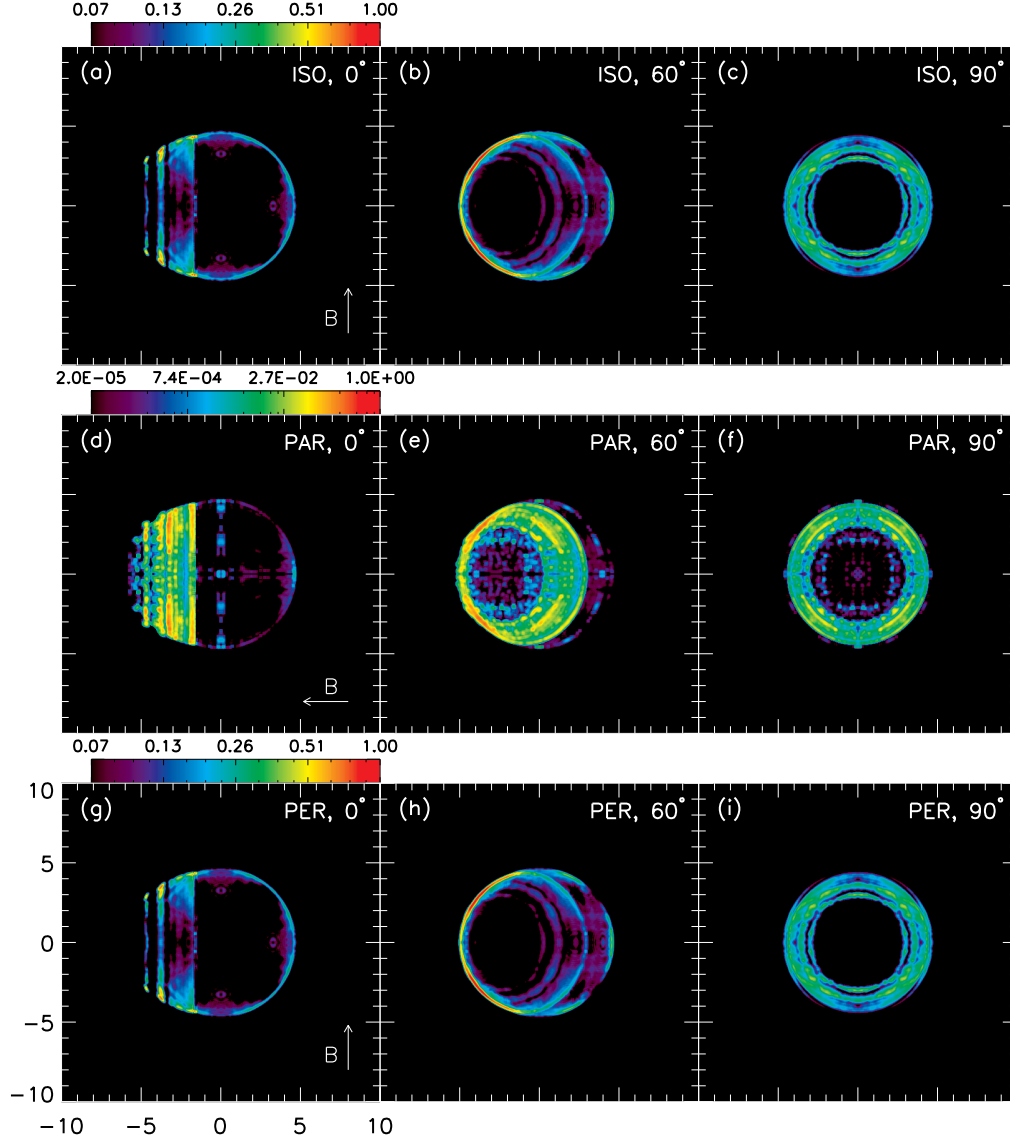


Figura 3.5: Synthetic synchrotron maps projected into the plane of the sky for three different orientations and for the three acceleration methods. The acceleration methods are indicated in the upper-right corner of each panel with the labels PAR (quasi-parallel), PER (quasi-perpendicular) and ISO (isotropic). In the maps of the upper and lower rows, the magnetic field is initially oriented perpendicular to the line of centres, while for the middle row it is oriented parallel to this line. The angular label in each panel indicates the amount of rotation towards the line of sight applied before projection. The colour bars shown are shared by the three subpanels of each row, and are given in units that are normalized to the same maximum value. Note that the scale is logarithmic, and that the middle row has a much wider range than the top or bottom row. The physical size is the same for all panels: 20×20 pc.

SNR. In that case, we find that the isotropic and quasi-perpendicular acceleration models produce the best results when the object is seen with the z -axis tilted about 60° with respect to the plane of the sky (panels b and e). These maps display the main features of G352.7-0.1, namely an ellipsoidal ring-like structure with a larger, incomplete arc. Note that a rotation angle of 60° is approximately that which is required to produce an ellipse with the axial ratio seen in the radio observations (see Fig. 3.1) from a circular ring.

Because of the geometric dependence of the particle acceleration efficiency on the obliquity angle, we expect that the quasi-parallel mechanism should yield comparable results when the ambient magnetic field is parallel, instead of perpendicular, to the line of centres. The panels d–f of the middle row correspond to this case. We see that when the line of sight is tilted about 60° (panel e), some of the ellipsoidal features of the isotropic or quasi-perpendicular cases are recovered. However, the larger incomplete arc becomes much fainter. It also appears that in the quasi-parallel case our synchrotron synthesis routine yields results that are more sensitive to small-scale structure in the hydrodynamic solution, which is made evident by the noisier appearance of these maps.

We also model the distribution of the X-ray emission from G352.7-0.1. Fig. 3.6 shows a synthetic X-ray map for $t = 5500$ yr in the range 0.15–8 keV. Interstellar absorption has been included in the calculation, assuming that the column density in the direction to G352.7-0.1 is $2.6 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ (Giacani et al. 2009). The most striking qualitative feature is that the emission is approximately central, in close agreement with the X-ray observations of Giacani et al. (2009) (see fig. 10 in that work).

Centre-filled X-ray morphologies are generally associated with middle-age remnants. To explain this behaviour, a critical factor is the decrease of the temperature behind the main shock below $\sim 10^6$ K, at which point radiative losses become important and the material behind the shock quickly cools. The result is that the X-ray emission behind the main shock decreases, possibly to a point where the less intense emission from the interior becomes dominant. In our simulations of G352.7-0.1, the remnant is beginning to transition into the radiative phase at $t = 5500$ yr, which puts it in the category of middle-age remnants. Because interstellar absorption will mainly attenuate the limb emission, the inclusion of absorption in our calculated maps reinforces the centre-bright feature of the emission.

It must also be noted that our simulations do not include the effects of thermal con-

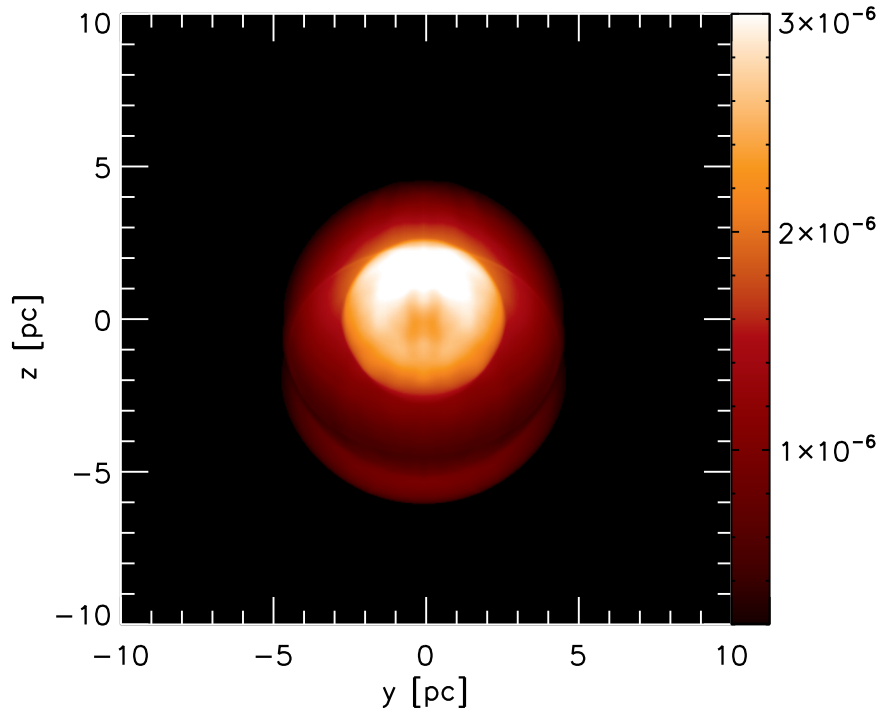


Figura 3.6: Simulated X-ray map in the range $0.15 - 8$ keV for $t = 5500$ yr. Absorption by a column density of $2.6 \times 10^{22} \text{ cm}^{-2}$ has been included. The indicated colour scale is given in units of $\text{erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$.

duction, which has been shown to have an important effect on the thermal X-ray emission when the remnant enters transitions to the radiative phase of evolution (see e.g. Balsara et al. (2008a), Balsara et al. (2008b), Zhou et al. (2011)). Our simulated maps correspond to a slightly earlier remnant age, in which the remnant is still in the Sedov phase and only about to start the transition into the radiative one. Moreover, it has been verified that the effect of thermal conduction is to shift the emission morphology from ring like to centrally peaked (e.g., Velázquez et al. 2004; Schneider et al. 2006; Tilley et al. 2006). Thus, we expect that the inclusion of thermal conduction in our simulations would in fact enhance the centrally peaked X-ray morphology obtained.

Finally, in Fig. 3.7 and 3.8 we show composite images where the calculated X-ray (red channel) and synchrotron (green channel) emissions have been superimposed. In Fig. 3.7, the synchrotron emission has been calculated using the quasi-perpendicular mechanism, while in Fig. 3.8 the quasi-parallel mechanism was used. We have oriented the images so that they can be compared directly to the observations (see Fig. 3.1). We observe that the synchrotron emission exhibits multiple arcs and rings, and that the X-ray emission is roughly contained within the radio structure.

3.5. Conclusions

We have explored a blowout scenario to explain the morphological features of the Galactic SNR G352.7-0.1. In our model, the SN explosion occurs inside but near the border of a spherical cloud. The consequence is that the remnant undergoes a considerable blowout into the lower density surrounding medium. The resulting hydrodynamical structure was then used to produce synthetic radio synchrotron and thermal X-ray maps, with the aim of comparing with the available observations.

The obtained synchrotron emission resembles the radio observations of G352.7-0.1 when the line joining the cloud and explosion centres forms an angle of 60° with the plane of the sky. This angle is in close agreement with the angle suggested in radio observations by the axial ratio of the ellipsoidal inner ring-like structure. We have explored the effects of different obliquity angle dependences on the particle acceleration efficiency, and found that both the quasi-perpendicular and quasi-parallel mechanisms can produce multiple ring-like or arc-like structures, noting that in our specific model for G352.7-0.1, the larger

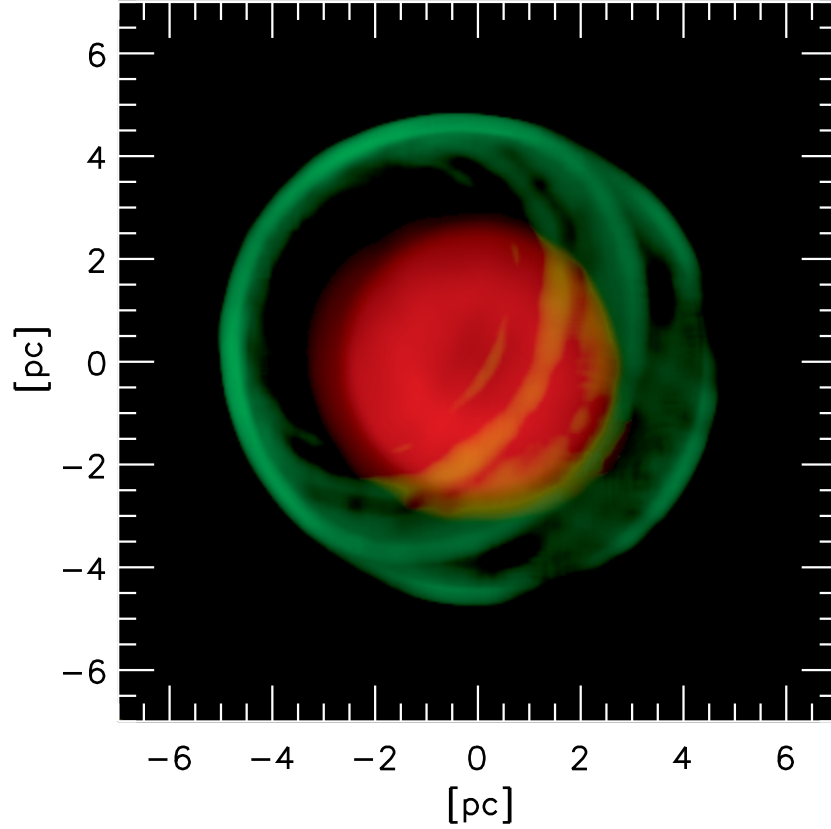


Figura 3.7: Composite image showing synthetic X-ray emission in the range $0.15 - 8$ keV (red channel) and synthetic synchrotron emission calculated using the quasi-perpendicular mechanism (green channel). The X-ray emission shown here ranges from 8×10^{-7} to 4×10^{-6} $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{sr}^{-1}$, while the synchrotron emission ranges from 6×10^8 to 1×10^{10} , in arbitrary units. The images have been smoothed to approximate the beam size employed in the observations.

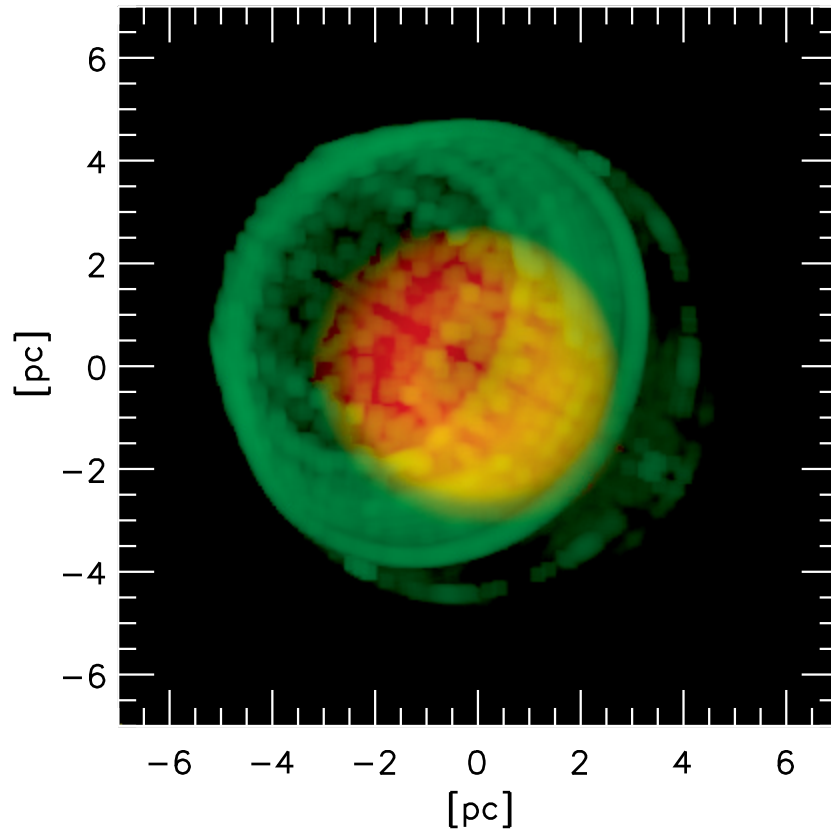


Figura 3.8: Same as Fig. 3.7, but with synchrotron emission calculated using the quasi-parallel mechanism.

incomplete arc is fainter than observed when using the quasi-parallel dependence. However, considering the results of recent numerical studies of other SNRs, we cannot conclude, based on our work, that one of the mechanisms should be generally dominant in this kind of astrophysical objects. An observational determination of the direction of the ambient magnetic field around this remnant, obtained through polarization measurements (such as the one by Reynoso et al. 2013 for SN1006), would certainly help restrict the possibilities.

We would like to emphasize the role played by the particle acceleration efficiency mechanism and the direction of the line of sight in producing distinct morphologies for SNR when the spatial structure of the remnant is not spherically symmetric. Both factors are capable to radically change the observed shape and features that are observed. This fact can certainly be exploited to produce simpler and more effective models for many asymmetrical SNRs.

As for the X-ray results, we recover a centre-filled morphology as observed in G352.7-0.1 when the synthetic emission is absorbed through a column density consistent with the value obtained from observations. Because the energy of the explosion is relatively low while the cloud density is higher than the usual ISM value, the transition of the remnant's evolution into the radiative phase occurs slightly after the time frame of the maps we have presented, thus reinforcing the notion that centre-bright X-ray emission correspond to middle-age remnants. We expect that including thermal conduction in our simulations would enhance the centrally peaked morphology.

Acknowledgements

The authors thank an anonymous referee for insightful and constructive comments that helped improve this study. We also thank Enrique Palacios for maintaining the 'Diable' cluster where the simulations were performed. PFV and AE acknowledge support from the CONACyT grants 61547, 101356, 101975, 167611, and UNAM DGAPA grant IN105312. EG is partially supported by grants UBACyT W011, PIP 0736/2012 (CONICET) and PICT-ANPCYT 0571/2011. CHIANTI is a collaborative project involving George Mason University, the University of Michigan (USA) and the University of Cambridge (UK).

Bibliografía

- Balsara, D. S., Tilley, D. A., & Howk, J. C. 2008, MNRAS, 386, 627
- Balsara, D. S., Bendinelli, A. J., Tilley, D. A., Massari, A. R., & Howk, J. C. 2008, MNRAS, 386, 642
- Blandford, R., Eichler, D. 1987, Phys. Rep., 154, 1
- Blondin, J. M., Wright, E. B. Borkowski, K. J., Reynolds, S. P. 1998, ApJ, 500, 342
- Bocchino, F., Orlando, S., Miceli, M., & Petruk, O. 2011, A&A, 531, A129
- Caswell, J. L., Haynes, R. F., Milne, D. K., Wellington, K. J. 1983, MNRAS, 203, 595
- Clark, D. H. 1973, Nature, 246, 28
- Dalgarno, A., McCray, R. A. 1972, ARAA, 10, 375
- Dere, K. P., Landi, E., Mason, H. E., Monsignori Fossi, B. C., Young, P. R. 1997, A&AS, 125, 149
- Dubner, G. M., Moffett, D. A., Goss, W. M., Winkler, P. F. 1993, AJ, 105, 2251
- Dubner, G. M., Giacani, E. B., Goss, W. M., Winkler, P. F. 1994, AJ, 108, 207
- Esquivel, A., Raga, A. C., Cantó, J., et al. 2010, ApJ, 725, 1466
- Fich, M., Blitz, L., Stark, A. A. 1989, ApJ, 342, 272
- Fulbright, M. S., & Reynolds, S. P. 1990, ApJ, 357, 591
- Giacani, E. B., Dubner, G. M., Green, A. J., Goss, W. M., Gaensler, B. M. 2000, AJ, 119, 281

- Giacani, E., Smith, M. J. S., Dubner, G., et al. 2009, *A&A*, 507, 841
- Ginzburg, V. L., Syrovatskii, S. I. 1965, *ARA&A*, 3, 297
- Harten, A., Lax, P. D., van Leer, B. 1983, *SIAM Rev.*, 25, 357
- Kesteven, M. J., Caswell, J. L. 1987, *A&A*, 183, 118
- Jokipii, J. R. 1987, *ApJ*, 313, 842
- Landi, E., Del Zanna, G., Young, P. R., et al. 2006, *A&AS*, 162, 261
- Manchester, R. N. 1987, *A&A*, 171, 205
- Miceli, M., Bocchino, F., Iakubovskyi, D., et al. 2009, *A&A*, 501, 239
- Orlando, S., Bocchino, F., Reale, F., Peres, G., Petruk, O. 2007, *A&A*, 470, 927
- Orlando, S., Petruk, O., Bocchino, F., & Miceli, M. 2011, *A&A*, 526, A129
- Petruk, O. et al. 2009, *MNRAS*, 393, 1034
- Petruk, O., Beshley, V., Bocchino, F., Miceli, M., & Orlando, S. 2011, *MNRAS*, 413, 1643
- Reynolds, S. P. 1998, *ApJ*, 493, 375
- Reynoso, E. M., Hughes, J. P., & Moffett, D. A. 2013, *AJ*, 145, 104
- Rothenflug, R., Ballet, J., Dubner, G., et al. 2004, *A&A*, 425, 121
- Schneider, E. M., de La Fuente, E., & Velázquez, P. F. 2006, *MNRAS*, 371, 369
- Schneider, E. M., Velázquez, P. F., Reynoso, E. M., de Colle, F. 2010, *MNRAS*, 408, 430
- Tilley, D. A., Balsara, D. S. & Howk, J. S. 2006, *MNRAS*, 371, 1106
- Toledo-Roy, J. C., Velázquez, P. F., de Colle, F., et al. 2009, *MNRAS*, 395, 351
- Toro, E. F., Spruces, M., Speares, W. 1994, *Shock Waves*, 4, 25
- Velázquez, P. F., de la Fuente, E., Rosado, M., Raga, A. C. 2001, *A&A*, 377, 1136
- Velázquez, P. F., Martinell, J. J., Raga, A. C., & Giacani, E. B. 2004, *ApJ*, 601, 885
- Wilner, D. J., Reynolds, S. P., & Moffett, D. A. 1998, *ApJ*, 115, 247
- Zhou, X., Miceli, M., Bocchino, F., Orlando, S., & Chen, Y. 2011, *MNRAS*, 415, 244

Capítulo 4

A 3D numerical model for Kepler's SNR

J. C. Toledo-Roy, A. Esquivel, P. F. Velázquez and E. M. Reynoso

Resumen

Presentamos nuevas simulaciones numéricas en 3D del remanente de supernova de Kepler. En este trabajo, retomamos la posibilidad de que la apariencia asimétrica del remanente en las observaciones de rayos X sea el producto de una explosión de tipo Ia, la cual ocurre en el interior de la burbuja de viento creada previamente por una estrella AGB compañera. Debido a la alta velocidad peculiar del sistema progenitor, la interacción del viento AGB con el medio interestelar produce una estructura de choque a proa. En este nuevo modelo, proponemos que el viento AGB es anisotrópico, lo cual se logra introduciendo una dependencia con la latitud en propiedades como la tasa de pérdida de masa y la densidad del viento, y que la orientación del eje polar de la estrella AGB no está alineado con la dirección de movimiento del sistema. Se modela el material eyectado por la explosión de tipo Ia empleando una ley de potencia, y dejamos que el remanente evolucione por 400 años. Calculamos mapas sintéticos de rayos X a partir de los resultados numéricos. Encontramos que el tamaño estimado y la morfología peculiar en rayos X son reproducidos por el modelo que considera una tasa de pérdida de masa $10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, una velocidad terminal del viento de 10 km s^{-1} , un medio ambiente con densidad de 10^{-3} cm^{-3}

y una energía de la explosión de 7×10^{50} erg. La luminosidad de rayos X del remanente en nuestro modelo alcanza un valor de 6×10^{50} erg, el cual se encuentra dentro de un factor de dos del valor observacional, y la evolución temporal de la luminosidad muestra una tasa de decaimiento de $\sim 2.4\% \text{ yr}^{-1}$ que es consistente con las observaciones. Este trabajo ha sido aprobado por un árbitro y será publicado en MNRAS como Toledo-Roy et al. (2014).

4.1. Introduction

Kepler’s supernova remnant (SNR; SN 1604, G004.5+06.8, V 843 Ophiuchi) is one of the few supernova events in our Galaxy that have been observed in historical times. Just above 400 years old, this young remnant has been observed by a multitude of scientific instruments in different spectral bands over the past decades: several VLA radio observations (e.g., Reynoso & Goss 1999; DeLaney et al. 2002), a submillimetric dust study by Morgan et al. (2003), optical imaging and spectroscopy using both ground-based telescopes and the Hubble Space Telescope (e.g., Blair et al. 1991; Green et al. 1997; Sollerman et al. 2003; Sankrit et al. 2008), *Spitzer* (Blair et al., 2007) and near-infrared (Gerardy & Fesen, 2001) imaging and spectroscopy, as well as multiple X-ray studies using the space telescopes *Einstein* (White & Long, 1983), *ROSAT* (Predehl & Schmitt, 1995), *ASCA* (Kinugasa & Tsunemi, 1999), *XMM-Newton* (Cassam-Chenaï et al., 2004) and *Chandra* (e.g., Bamba et al. 2005; Reynolds et al. 2007).

The observations across multiple wavelengths reveal a complex morphology which is prominently asymmetrical. In Fig. 4.1 we present a radio image at 1.42 GHz (Fig. 4.1a, left panel) reprocessed from archival VLA¹ observations, and an X-ray image from the *Chandra* catalog (Fig. 4.1b, right panel) in the band 2.1–10 keV. In both bands, the remnant appears as an incomplete shell which is considerably brighter to the Northwest and displays two protuberances (“ears”) that are roughly aligned with the Southeast-Northwest axis (Dickel et al., 1998). Another remarkable feature is a curved bar-like structure that spans across the remnant roughly from its South to North limbs. The diameter of the shell is approximately 3.3 arcmin (Blair, 2005). In the optical (e.g. Sankrit et al., 2008), the emission comes from dense, knotty structures (radiative shocks) with an excess of nitrogen, and from thin H α

¹The Very Large Array (VLA) is operated by the National radio Astronomy Observatory, which is a facility of the National Science Foundation, operated under cooperative agreement by Associated Universities, Inc.

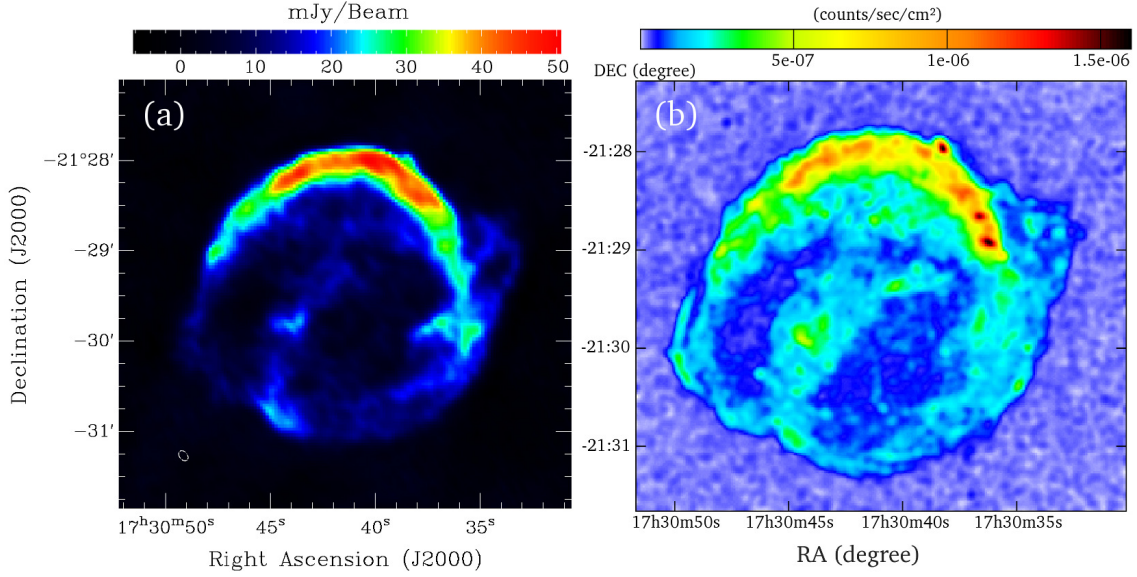


Figure 4.1: (a) VLA image of Kepler’s SNR at 1.4 GHz. The beam is 7.6×5.3 arcsec, with a position angle of 39.8° (bottom left). The intensity scale, in mJy beam^{-1} , is displayed in the bar at the right. (b) *Chandra* catalog X-ray image of Kepler’s SNR in the band 2.1–10 keV.

filaments (non-radiative shocks). Overall, the optical emission roughly corresponds to the bright NW regions in radio and X-rays.

The nature of Kepler’s supernova explosion has been very debated. The relatively high Galactic latitude of the remnant ($l = 6.8^\circ$) and the reconstructed light curve based on historical observations (Baade, 1943) initially prompted a Type Ia identification. However, its high spatial motion away from the Galactic plane and the presence of nitrogen in optical observations (which is usually associated with stellar winds) challenged this view, suggesting a core-collapse scenario instead (e.g., Borkowski et al. 1992). Nevertheless, X-ray studies have generally provided evidence in favor of the initially suggested Type Ia scenario. In particular, the large iron abundance (Kinugasa & Tsunemi 1999; Cassam-Chenaï et al. 2004), which is consistent with Type Ia supernovae, as well as the absence of a neutron star Reynolds et al. (2007) which would be an additional indication of a core-collapse event, have led (Reynolds et al., 2007) to conclude that Kepler’s SNR is the result of a Type Ia explosion. Furthermore, the hydrodynamical models of Borkowski et al. (1992) and Velázquez et al. (2006) found that a Type Ia origin produces numerical results that are a closer match to the observations.

The most likely explanation for the asymmetric brightness of the northwestern region

is that the medium in which the ejected material expands is inhomogeneous. Since strong density gradients are not expected at such high altitude above the Galactic plane, this suggests that the progenitor system had an important role in shaping the circumstellar medium (CSM). Van der Bergh et al. (1977) analyzed the proper motions of optical knots within the nebula and determined that the progenitor must have had a high peculiar velocity relative to the ambient medium. Using more recent data, Bandiera & van den Bergh (1991) determined this velocity to be around 280 km s^{-1} .

This prompted the idea that the northwestern region is the product of the interaction between the supernova shock wave and the bow shock structure produced by the stellar wind of an evolved star as it travels through the ambient medium. Bandiera (1987) and Borkowski et al. (1992) investigated this “runaway progenitor” hypothesis in depth and found that it can explain not only the brightness of the northwestern region, but also the absence of a sharp limb on the southern edge. This idea can also be reconciled with a Type Ia explosion if the progenitor was in fact a symbiotic binary system: the wind of the AGB donor star blows a bubble in the CSM in which the white dwarf companion later explodes. The 2D numerical models of Chiotellis et al. (2012) explored this specific scenario in great detail and obtained results that quite accurately reproduce the X-ray morphology and kinematics of the remnant. Burkey et al. (2013) improved the results by including in the 2D simulation an equatorial wind from the AGB donor. The authors were able to isolate the shocked CSM from the SN ejecta by applying a Gaussian mixture model to *Chandra* spectral data and found that the shocked CSM is coincident with the bright northern rim and parts of the central bar.

The presence of asymmetries such as bipolar outflows in many planetary nebulae suggests that the wind ejected during the AGB or post-AGB phase must have some degree of anisotropy (e.g., Mellema 1995; Gruendl et al. 2006). Moreover, anisotropic AGB winds have been detected through high-resolution molecular line observations (e.g., Bieging & Tafalla 1993; Lucas et al. 1995). While many 2D models assume that the AGB wind and resulting SNR expansion are axially symmetric, this is not necessarily the case.

The main goal of this work is to explore a range of fully 3D numerical models that might explain the X-ray appearance of Kepler’s SNR based on the runaway symbiotic binary scenario, introducing a source of asymmetry by considering a possible anisotropy in the AGB wind. The paper is organized as follows. In Section 4.2, we discuss the details

of the 3D model. The details of the numerical simulations are then explained in Section 4.3. The results are presented in Section 4.4 and discussed in Section 4.5. Finally, we give our conclusions in Section 4.6.

4.2. The model

In order to explain the asymmetric features of Kepler’s SNR, we have explored a numerical model that is based on Bandiera’s runaway progenitor scenario, but with the additional consideration that the AGB wind is not isotropic. That is, the model assumes that the SN explosion occurred inside an asymmetric CSM density distribution produced by the companion AGB star before the mass-transfer resulting in a Type Ia explosion was complete. The peculiar structure of this wind bubble is shaped by two factors: (1) the bow shock produced by the high velocity motion of the AGB star through the ambient galactic medium, and (2) the latitude dependence of the properties (density and terminal velocity) of the AGB wind. The combination of these two elements yields a complex CSM which determines the appearance of several striking morphological features of the expanding SNR.

The proper motion of the AGB star results in the characteristic “cometary” double-shock structure consisting of a forward bow shock which compresses the interstellar medium (ISM), an inner reverse shock where the stellar wind is slowed down and compressed, and a contact discontinuity separating shocked ISM from shocked stellar wind. The properties of this structure are determined by four parameters: the mass-loss rate of the stellar wind, $\dot{M}$, the terminal velocity of the wind, v_w , the peculiar velocity of the AGB star through the ISM, $v_\star$, and the mass density of the ISM, ρ_0 .

The system reaches a steady state on a timescale given by $t_{\text{flow}} \equiv l/v_w$, where l is a characteristic length scale that is of the order of the distance from the bow shock to the wind source (Chiotellis et al., 2012). In a steady state, the distance from the wind source to the termination shock produced by the interaction of stellar wind and the ISM depends on the balance between the momentum fluxes of the two flows. This is an important quantity for it determines the size of the wind bubble in which the SNR expands. For the isotropic wind case, by balancing momentum fluxes we can compute the stagnation distance r_0 as

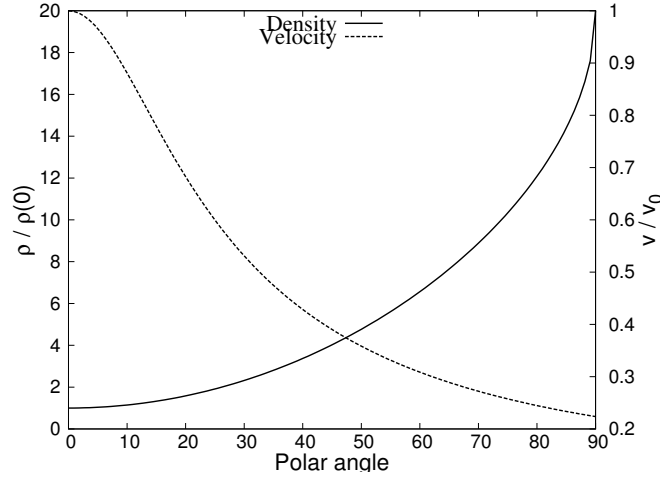


Figura 4.2: Density (continuous line) and velocity (dashed) profiles as a function of polar angle (0° at the pole and 90° at the equator) for $\xi = 20$, normalized to the values at the pole.

$$r_0 = 2.47 \left(\frac{\dot{M}_w v_w}{n_0 v_\star^2} \right)^{1/2} \text{ pc}, \quad (4.1)$$

where $\dot{M}_w$ is given in units of $10^{-5} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, v_w , of 10 km s^{-1} , $n_0 = \rho_0/(\mu m_H)$, of 10^{-3} cm^{-3} (where μ is the mean atomic mass and m_H the mass of the hydrogen atom), and $v_\star$, of 280 km s^{-1} . Even though in our models the wind is anisotropic, for simplicity we have chosen the wind density and terminal velocity in such a way (see below) that the ram pressure ρv^2 is isotropic.

In order to model the anisotropic AGB wind, we have used the same latitude dependence employed by Raga et al. (2008) to model the tail of the AGB star Mira. In this resulting wind structure, the terminal velocity and density of the wind have a latitude dependence, with the density increasing from the equator towards the poles, and the velocity in the opposite direction. The density of the wind is given by

$$\rho(r, \theta) = \frac{A}{r^2} f(\theta), \quad (4.2)$$

where A is a scaling constant. The latitude-dependence function f is specified by

$$f(\theta) = \xi - (\xi - 1)|\cos \theta|^{1/2}, \quad (4.3)$$

where θ is the polar angle (0° at the pole and 90° at the equator) and $\xi > 1$ is the equator-to-pole density ratio. The terminal velocity of the wind is also a function of latitude and is given by

$$v_w(\theta) = \frac{v_{\text{pole}}}{\sqrt{f(\theta)}}. \quad (4.4)$$

The density and velocity profiles corresponding to $\xi = 20$ are plotted in Figure 4.2.

This choice of density and velocity guarantees that the ram pressure of the wind, ρv^2 , is isotropic. The scaling constant A can be computed by associating the mass-loss rate of the wind to the integral of the density and velocity; for this particular choice of the function $f(\theta)$ and an equator-to-pole density ratio of $\xi = 20$, Raga et al. (2008) obtained $A = 0.389 \dot{M}_w / (4\pi v_{\text{pole}})$.

Finally, we allowed the polar axis to be tilted by an angle ϕ . We have found that a tilt angle of $\phi \approx 70^\circ$ produces satisfactory results. This eliminates any remaining symmetry in the problem and thus requires a fully 3D simulation.

4.3. Numerical simulations

4.3.1. Numerical Method

We performed numerical simulations using the 3D hydrodynamical adaptive mesh refinement WALICXE3D code developed by J.C. Toledo-Roy. The code is an extension to 3D of the WALICXE code (Esquivel et al., 2010), and has been used to model the multiple-ring SNR G352.7-0.1 (Toledo-Roy et al., 2013).

The code solves the Euler equations of gas dynamics, which can be written in conservation form as:

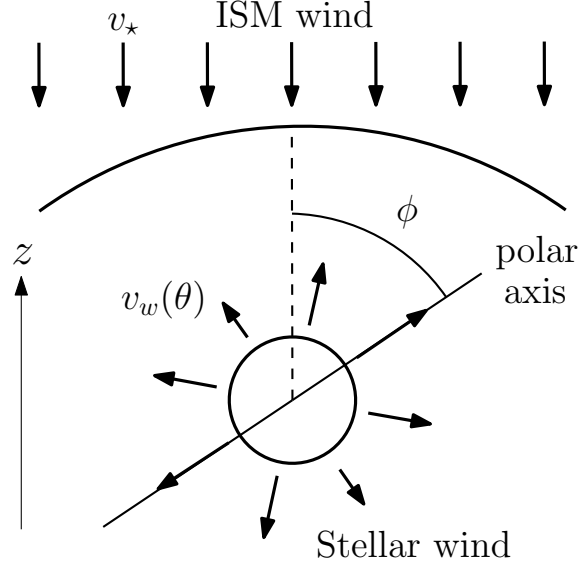


Figure 4.3: A schematic representation of the initial setup for the AGB wind phase.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial P}{\partial x_j} = 0, \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial(u_i(E + P))}{\partial x_i} = -n^2 \Lambda(T), \quad (4.7)$$

where ρ is the mass density, u_i are the components of the fluid velocity, and P is the gas pressure. The total energy density E is given by

$$E \equiv \frac{1}{2} \rho u_i u_i + \epsilon, \quad (4.8)$$

where the density of internal energy ϵ is related to the gas pressure through the ideal gas equation of state, $\epsilon = P/(\gamma - 1)$. The Einstein summation notation has been used throughout.

The code solves equations (4.5)–(4.7) by means of a finite-volume, conservative, second-order Godunov upwind scheme. The Riemann solver uses a second-order Runge-Kutta method for the time integration and a linear spatial reconstruction of the primitive variables

at the interfaces, including a slope limiter in order to suppress spurious oscillations. The numerical fluxes are calculated using the HLLC solver, which is a contact discontinuity-capturing modification by Toro et al. (1994) of the original HLL solver (Harten et al., 1983). Since the cooling region behind the main shock cannot be resolved at typical grid resolutions, the code does not limit the integration timestep to the cooling timescale, employing only the dynamical timescale (through the standard Courant-Friedrichs-Lewy condition) to limit the timestep size.

For specific details of the code, such as those related to the numerical integrator, the adaptive mesh algorithm, or the parallelization scheme, see the appendix of Esquivel et al. (2010), where the precursor 2D version of WALICXE3D is described.

The code also includes radiative cooling as a source term in the energy equation, eq. (4.7), in which $\Lambda(T)$ is a parametrized cooling function and n is the gas number density. The cooling function $\Lambda(T)$ is taken as a tabulated coronal equilibrium curve (Dalgarno & McCray, 1972), which is plotted in figure 2 of Toledo-Roy et al. (2009). This cooling function is well suited for temperatures above 10^4 K. Below this threshold, it is turned off, and above 10^8 K it is substituted by a $\Lambda \propto T^{1/2}$ law (corresponding to the free-free regime). It is worth mentioning that the temperature used in the cooling calculation is computed by assuming that gas above 10^4 K is fully ionized. This is achieved by using the correct mean atomic mass of $\mu = 0.6$ where appropriate, instead of the value for neutral gas.

4.3.2. Calculation of the thermal X-ray emission

In order to further compare the results of the numerical simulations with the observations, we have also calculated synthetic thermal X-ray maps by integrating the X-ray emission coefficient $j_\nu(n, T)$. The coefficient was calculated (in the low density regime) as $j_\nu(n, T) = n_e^2 \xi(T)$, where n_e and T are the electronic density (assumed to be $n_e \approx n_H$) and temperature obtained from our numerical simulations, while $\xi(T)$ is a function smoothly varying with temperature. The function $\xi(T)$ was computed for the range $0.15 - 8$ keV and standard solar metallicity using the CHIANTI atomic database and its associated IDL software (Dere et al., 1997; Landi et al., 2006). In the calculation of these emission coefficients, we have considered the high metal abundances found in Kepler’s SNR (see, e.g., Cassam-Chenaï et al. 2004, Reynolds et al. 2007). Specifically, we have used the va-

Parameter	Model A	Model B	Model C	Model D
$\dot{M}$ ($M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$)	7×10^{-6}	10^{-5}	3×10^{-6}	4×10^{-6}
v_{pole} (km s^{-1})	15	10	20	12
n_0 (cm^{-3})	10^{-3}	10^{-3}	6×10^{-4}	5×10^{-4}
r_0 (pc)	2.06	2.01	2.01	1.97
M_{ejected} ($M_{\odot}$)	3.5	5.0	1.5	2.0

Tabla 4.1: Wind parameters for the numerical models. The following parameters are common to all models: $v_{\star} = 280 \text{ km s}^{-1}$, $T = 1000 \text{ K}$ and $\mu = 1.3$.

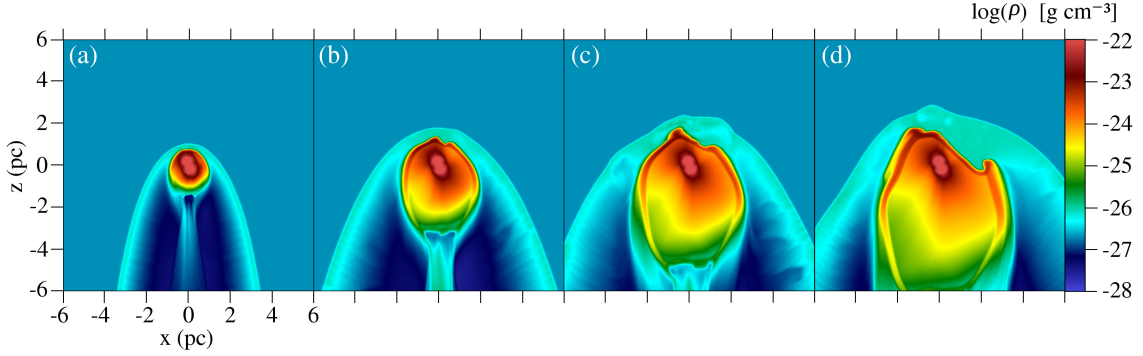


Figura 4.4: Evolution of the AGB wind for Model B. Shown here are xz cuts at $y = 6 \text{ pc}$ of the mass density for the integration times (a) 50 kyr, (b) 200 kyr, (c) 350 kyr and (d) 500 kyr. The logarithmic scale is the same for all panels and is given in g cm^{-3} .

lues of the two-component thermal plasma model of Kinugasa & Tsunemi (1999), which are reported in the Chandra Supernova Remnant Catalog. These include specific metal enhancements for Si and S. The effects of considering additional metal enhancements are discussed in Section 4.5.

4.3.3. Initial conditions: precursor AGB wind

The code is first used to compute the evolution of the stellar wind originating in the AGB companion star. In order to do this, we have initialized the computational domain, which spans a box of $12 \times 12 \times 12 \text{ pc}$, with a uniform medium of number density n_0 and temperature of 10^4 K .

The anisotropic wind source is fixed at the center of the box and in order to represent the effects of the star's proper motion through the ISM, an inflow condition is imposed on the wall at the $+z$ face having a velocity of $v_{\star} = 280 \text{ km s}^{-1}$ and moving towards the $-z$ direction. The boundary conditions on the rest of the walls are transmissive. The

wind is made anisotropic as explained in Section 4.2. In Figure 4.3 we show a schematic representation of the initial setup.

In this work we have explored four numerical models using different combinations of the mass-loss rate ($\dot{M}_w$) and terminal velocity at the pole (v_{pole}) of the AGB wind. These values range from 3×10^{-6} to $1 \times 10^{-5} \text{ M}_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ for the mass-loss rate and from 10 to 20 km s^{-1} for the wind terminal velocity. The specific values for each model are given in Table 4.1.

Since $\dot{M}_w$ and v_{pole} are fixed in each model, and we have used a constant value for $v_{\star}$ across all models, we have in each case selected the ISM number density n_0 so that an equivalent isotropic stagnation distance r_0 of $\sim 2 \text{ pc}$ is obtained. The specific values for the ISM density in each case are also reported in Table 4.1. While it is hard to directly assess the density in the region surrounding Kepler’s SNR, these values fall in the range $n_0 \sim 10^{-4} - 10^{-3}$, which is typical of the hot ionized component of the ISM (McKee & Ostriker, 1977). This component might very well extend into the remnant’s galactic latitude. These values are also in agreement with those used in the numerical models of Borkowski et al. (1992) and Chiotellis et al. (2012).

The AGB wind is then left to evolve for an integration time large enough that the bow shock structure would in principle arrive at a quasi-steady state. This time can be set by computing the flow timescale defined in Section 4.2. Using the values $l \sim 2 \text{ pc}$ (the distance between the wind source and bow shock) and $v_{\text{pole}} \sim 10 \text{ km s}^{-1}$ (the lowest value in all models), we obtain that the flow timescale is no larger than $t_{\text{flow}} \sim 200 \text{ kyr}$ across all models. Thus, a total integration time of 500 kyr guarantees that a steady state should be approximately reached. This is also within the estimated lifetime of the AGB star. However, while the position of the bow shock does reach an approximate steady state, the contact discontinuity becomes noticeably Kelvin-Helmholtz unstable in all models at around 200 kyr, producing a complex time-dependent flow in the region inside the bow shock.

The density cuts of Figure 4.4 show the evolution of the AGB wind for Model B at four time snapshots. The typical four-region structure produced by the interaction of the AGB wind with the ISM can be seen divided by three discontinuities in the flow. The outermost one is the bow shock, where the ISM is shocked and compressed. This shock reaches a minimum distance from the wind source of about 3 pc in the final snapshot

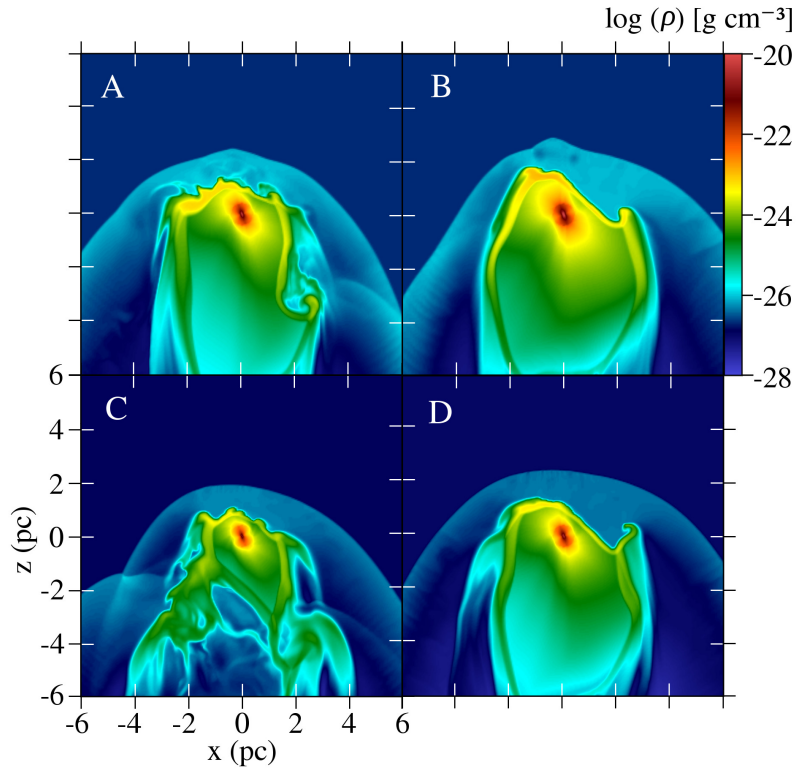


Figure 4.5: A comparison of the AGB wind structures at $t = 500$ kyr for all four models. Shown here are xz cuts at $y = 6$ pc of the mass density. The model is indicated by the letter in the upper left corner. The logarithmic scale is the same for all panels and is given in g cm^{-3} .

(except for model C, in which the bow shock extends to about 2 pc). Farther in, towards the wind source, a strong density jump is encountered marking the contact discontinuity that separates shocked ISM from shocked stellar wind material. Finally, the shocked stellar wind is divided from the free-streaming wind by the termination shock, across which a final density jump yields to the unperturbed stellar wind originating in the central source.

The shear between the flows at the contact discontinuity becomes susceptible to the Kelvin-Helmholtz instability at about 200 kyr, thus producing a complex flow morphology that prevents the wind structure from achieving a true steady state. Thus, the predicted stagnation distance of 2 pc is only approximately reached. This complex wind bubble will strongly influence the evolution and morphology of the subsequent SNR.

In Figure 4.5 we compare the final wind bubble structure of all four models at $t = 500$ kyr. Models A, B and D display a qualitatively similar structure, with a clear wind bubble and a well-defined, albeit somewhat Kelvin-Helmholtz unstable, contact discontinuity. Model C, however, exhibits a much more turbulent wind structure downstream of the central wind source. The main difference between this model and the rest is that the wind terminal velocity is higher, 20 km s^{-1} , which would result in a stronger shearing between the flows at the contact discontinuity, thus enhancing the instability and producing the observed turbulent structure.

Since the typical mass loss rates of AGB stars can be as high as $10^{-5} \text{ M}_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ while the AGB phase might last as much as 1 Myr (Vassiliadis & Wood, 1993), we have checked that the total mass ejected by the AGB wind in all models does not surpass $\sim 5 \text{ M}_{\odot}$ by the time we introduce the SNR into the simulation. The mass ejected by the models is reported in last row of Table 4.1, with model B having the highest value.

4.3.4. Initial conditions: supernova remnant

After letting the wind bubble evolve for each model, the supernova explosion is imposed in the computational domain by injecting $E = 7 \times 10^{50} \text{ erg}$ and $M = 1.4 \text{ M}_{\odot}$ into a spherical region at the center of the domain. This choice of the energy in the explosion was made in order to match the observed linear size of the object deduced from the assumed distance to Kepler’s SNR, which we consider to lie in the lower range of 3.4–6.4 kpc (with a “nominal” value of $\sim 5 \text{ kpc}$) as found by Reynoso & Goss (1999) based on HI absorption. Patnaude et al. (2012) showed that in this case the resulting forward shock radius requires the explosion

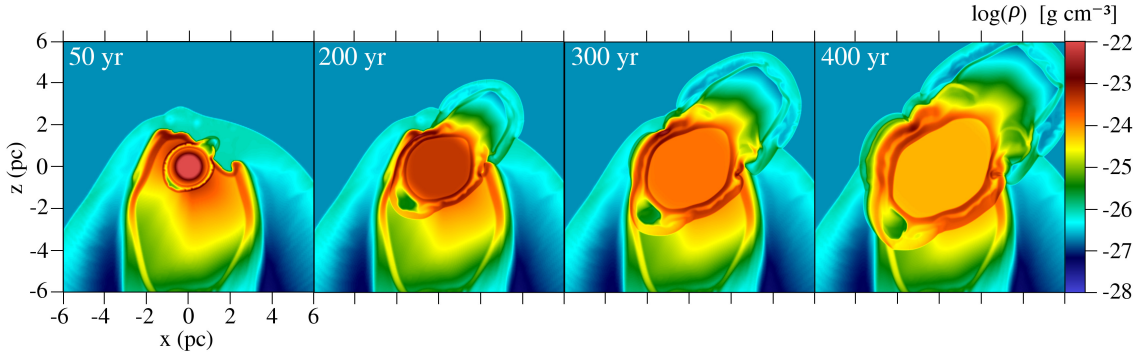


Figure 4.6: Evolution of the supernova remnant for Model B. Shown here are xz cuts at $y = 6$ pc of the mass density corresponding to SNR ages of 50, 200, 300 and 400 yr. The logarithmic scale is the same for all panels and is given in g cm^{-3} .

to be subenergetic.

Since the early evolution of SNRs is sensitive to the detailed kinematics of the SN ejecta, we have followed the prescription of Jun & Norman (1996) for SN Ia ejecta. Here, $3/7$ of the ejecta mass are injected into the outer portions of the spherical region with a power-law density profile $\rho \sim r^{-7}$, while the remaining $4/7$ form an inner “core” of constant density ρ_c . The explosion energy is distributed as 95% kinetic energy with the rest as thermal energy, and the velocity profile is assumed to increase linearly with radius, reaching a value v_0 at the edge of the region. The radius r_c and density ρ_c of the inner core, as well as the velocity v_0 at the edge of the ejecta region, can be computed in terms of the explosion energy E and the total mass M and radius R of the SN ejecta; see equations (1)–(3) of Jun & Norman (1996).

While it is not possible to predict analytically the expansion of the SNR in the asymmetric bubble left behind by the AGB wind, we do not expect the results to be substantially different from those obtained by considering an isotropic wind source of comparable momentum flux. However, since there is still some degree of uncertainty in the distance to Kepler’s SNR, the physical radius of the remnant is poorly known. The full range of distance estimates produces a radius in the range 1.5–5.1 pc, with the “midrange” value of 5 kpc yielding a radius of 2.5 pc. It is therefore difficult to place an observational restriction on the size of the remnant obtained in the simulations. As is shown below, the remnant indeed reaches a size of 2–3 pc in the simulations.

As discussed above, the size of Kepler’s SNR is poorly determined. In contrast, its age

is very precisely known, since the supernova was famously observed by Johannes Kepler in 1604. This implies that at the time of the *Chandra* X-ray observations in 2000 and 2006 (Vink, 2008), the age of the SNR was 396 and 402 years, respectively. Since our goal is to calculate and compare synthetic X-ray observations, we let the SNR evolve for 400 years in the simulation in all models.

4.4. Results

The density maps in Figure 4.6 show the evolution of the SNR of Model B at $t = 50$, 200, 300 and 400 years after the explosion. In this model, the expanding shockwave reaches and penetrates the termination shock of the wind at $t \approx 50$ yr. This produces an important blowout of part of the remnant that rapidly expands into the low density region between the contact discontinuity and the bow shock, subsequently piercing into the ISM at around 150 yr. By the end of the simulation, this blowout has grown to more than 6 pc in size in the ISM. The shock compression increases the temperature of this material to 10^9 K, but its density remains rather low ($\lesssim 10^{-26}$ g cm $^{-3}$) compared to densities seen elsewhere in the remnant. As will be shown below, this material has negligible X-ray emissivity and thus does not play any role in the observed shape of the remnant.

Other parts of the remnant expand mostly into the high-density wind bubble. The wind material is swept up by the blastwave producing a dense (as high as 10^{-23} g cm $^{-3}$ in some areas) asymmetric shell that reaches around 2–3 pc in radius, consistent with the approximate observational size of the remnant if the distance is taken to be around 5 kpc.

The expansion parameter, defined as $m \equiv v/(R/t)$ where v is the shock velocity at radius R and t is the age of the remnant, varies in the dense shocked regions of Model B in the range between $m \approx 0.4$, which is the asymptotic value in the Sedov-Taylor phase, and $m \approx 0.8$. This is consistent with the average value found from X-ray observations, $m \approx 0.6$ (Vink, 2008).

Figure 4.7 shows a comparison of the final density maps of all models. The evolution is generally qualitatively similar to that described for Model B, except for the overall size of the structure produced, which is seen to depend on the density of the wind bubble (compare the panels of Figure 4.5). Model B has the densest wind bubble of all models and the shock compression by the SN blastwave produces the largest density values.

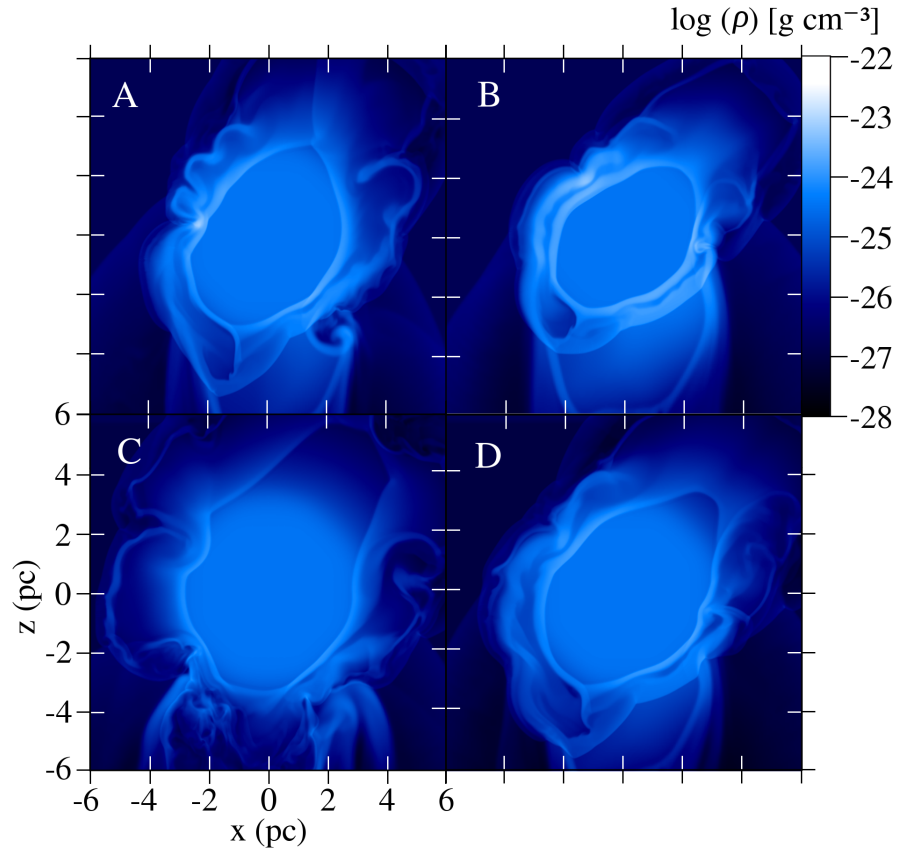


Figura 4.7: Comparison of the mass density for the four models at $t = 400$ yr (xz cuts at $y = 6$ pc). The logarithmic scale is the same for all panels and is given in g cm^{-3} . The model is indicated in each panel by the letter in the upper left corner.

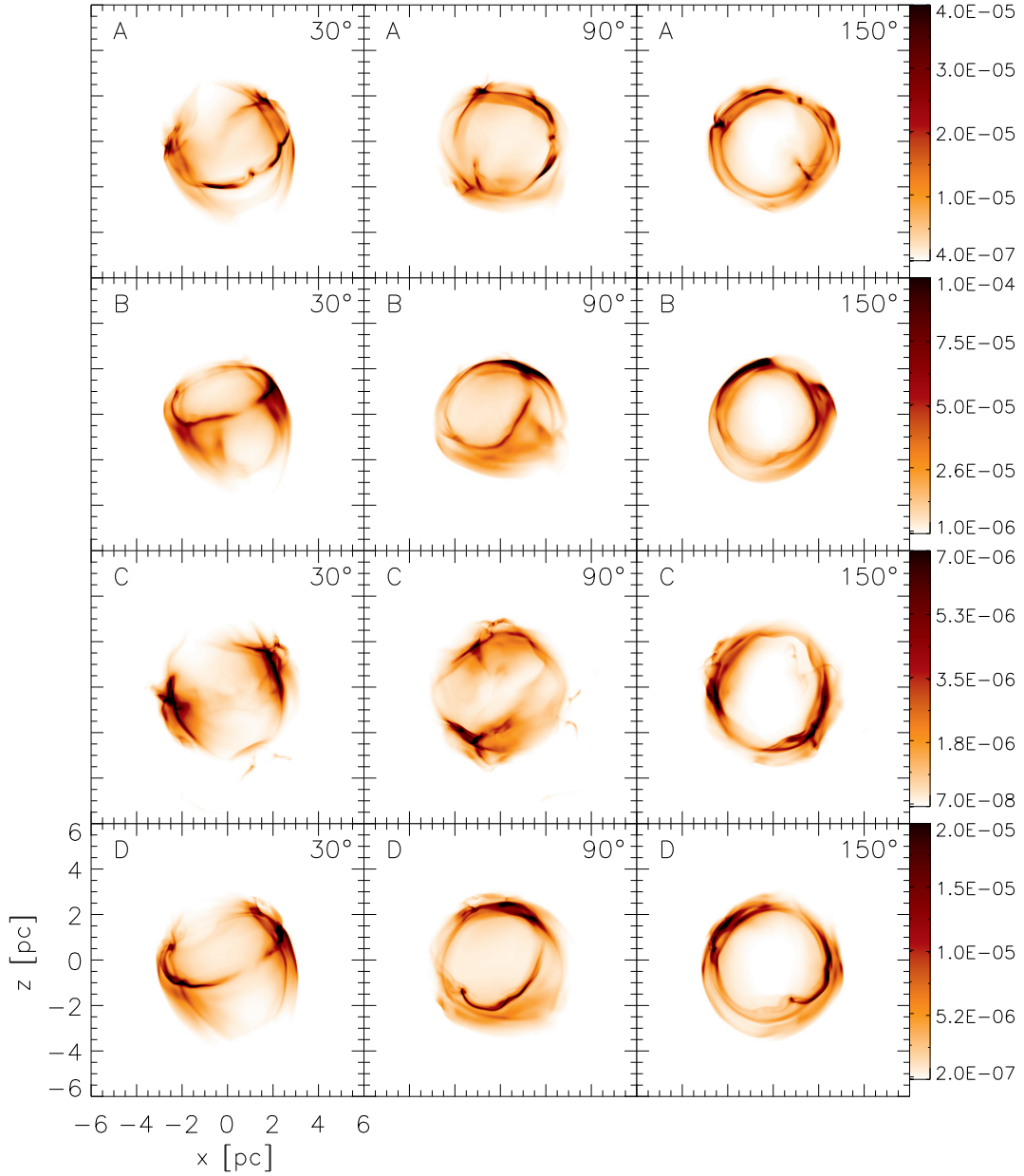


Figure 4.8: Synthetic X-ray maps in the range 2–10 keV. The model is indicated in each panel with the letter in the upper left corner, while the number in the upper right corner indicates the rotation angle around the z -axis (see text). The linear scale given to the right is the same for the panels corresponding to each model. The horizontal and vertical axes are the same for all panels, with distances given in pc as shown in the bottom left panel.

Since the main goal of this work is to directly compare the models with the observations, we have generated synthetic X-ray maps from the simulation data. Figure 4.8 shows the calculated X-ray emission in the range 2–10 keV (similar to the energy range of the *Chandra* observations). The four rows of the figure correspond to each of the four models A, B, C and D (which are also indicated by the letter in the upper left corner). Interstellar absorption has been included in the calculation of the X-ray coefficients using the column density value of $5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$ reported by Reynoso & Goss (1999) for the “midpoint” distance of $\sim 5 \text{ kpc}$.

In order to generate these maps, the z -axis of the computational domain, which is aligned with the direction of motion of the progenitor system relative to the ISM, was first tilted towards the observer at an angle of 35 degrees with respect to the line of sight. This was done so that the orientation of the object coincides with the direction of the velocity of the system determined from the tangential-to-radial velocity ratio of optical knots by Bandiera & van den Bergh (1991).

Additionally, in order to account for the remaining rotational degree of freedom, the resulting coordinate system was rotated a second time around the new vertical axis in steps of 10° , from 0° to 180° . In the figure, we show maps for 30° , 90° and 150° (indicated in the upper right corner of each panel), which adequately sample the full range of maps generated in this manner.

We have also computed the total X-ray luminosity L_X of the remnant for each model and the mass of the emitting gas, the latter defined as the mass of the gas with temperature higher than 10^6 K . The results are reported in Table 4.2. The time evolution of the total X-ray luminosity is plotted for all models as thick continuous lines in Figure 4.9. The luminosity in the first decades of the simulation decreases as the remnant expands into the wind of the AGB. At around 50–100 yr, the shockwave reaches the dense region at the termination shock of the wind and the luminosity increases substantially, reaching a peak value at around 200–250 yr. After that, the luminosity decreases gradually until the present age of the remnant is reached. For model B, the decrease in past decades is around 2.4 % per decade, which is consistent with observational (Hughes, 1999) and numerical results (Velázquez et al., 2006).

4.5. Discussion

By looking at the leftmost column of Fig. 4.8, corresponding to 30° , we see that all four models depict a somewhat similar overall morphology: a roughly spherical diffuse emission and a bright incomplete ring-like feature seen on the side. This feature is associated with the interaction of the supernova shockwave and the equatorial regions of the AGB wind, where the density is the highest. However, the models differ slightly (particularly model C) in the shape, orientation and completeness of the ring feature. Also, in all cases a clear enhancement of the emission is seen in the direction going roughly from the lower left to the upper right corner of the figures, which coincides with the equatorial region.

As the view is rotated further to an angle of 90° , the ring-like feature superimposes onto the diffuse emission producing interesting morphological features. Particularly, in models B and D this produces an enhancement of the limb on the upper side and a bar-like feature extending from the lower to the upper limb. This feature is strikingly similar to that observed in the X-ray images, especially in model B. Finally, at an angle of 150° the morphology becomes almost entirely ring-like. The overall size of the remnant in all maps is also in close agreement with the observed radius of 2–3 pc.

According to Table 4.2, the models are subluminescent compared to the observed *Chandra* value of $1.2 \times 10^{35} \text{ erg s}^{-1}$. The highest luminosity value of $5.7 \times 10^{34} \text{ erg s}^{-1}$ is obtained in model B, which is only within a factor of two of the observed value for this energy band. Also, the mass of X-ray emitting gas seems to be lower than estimated by Velázquez et al. (2006). Again, model B exhibits the highest value, which is not surprising considering its higher luminosity.

In a recent study based on the data from the *Suzaku Observatory*, Park et al. (2013) found evidence that Kepler’s progenitor probably had a super-solar metallicity ($\sim 3 Z_\odot$), considering the observed Ni to Fe mass ratio. In order to assess the impact that metallicity can have on the X-ray emission, we have also computed the luminosity of the model assuming that all the X-ray emitting gas has a three times solar metallicity (in contrast to the abundances obtained by Kinugasa & Tsunemi 1999). We obtained a $\sim 40\%$ increase in the luminosity across all models (see the second row of Table 4.2). For model B, this boosts the value from 5.7×10^{34} to $8.1 \times 10^{34} \text{ erg s}^{-1}$, which is closer to the observed value. The corresponding luminosity time evolution curves are shown as the thin dashed

Quantity	Model A	Model B	Model C	Model D
L_X (10^{34} erg s $^{-1}$)	2.0	5.7	0.44	1.2
	2.8	8.1	0.64	1.7
M_X ($M_\odot$)	2.4	3.5	1.6	1.9

Tabla 4.2: Total X-ray luminosity (L_X) and mass of the X-ray emitting gas (M_X) for all four models at $t = 400$ yr. The lower luminosity values (second row) were obtained assuming a metallicity $Z = 3$ solar (see text). The mass of X-ray emitting gas is the same in both cases.

lines in Figure 4.9. The time evolution is in each case qualitatively very similar in spite of the luminosity increase.

In view of its morphological features, size and X-ray luminosity, we consider that model B is the one that most successfully explains the origin of Kepler’s SNR. In Fig. 4.10, we show the X-ray map corresponding to this model for a rotation angle of 70° with a color map and scale similar to the one used in the Chandra image (Fig. 4.1b).

Notwithstanding, the total mass ejected during the AGB wind phase in model B ($\sim 5 M_\odot$) would require a considerably massive ($\gtrsim 6 M_\odot$) AGB companion. By comparing the predicted chemical yields of AGB stars of Karakas & Lattanzio (2007) with the chemical composition of the shell, Chiotellis et al. (2012) estimate that the AGB companion was probably in the $4\text{--}5 M_\odot$ range. In order to have a total ejected mass of $5 M_\odot$ and leave behind a stellar core of around $1 M_\odot$ (Soker et al., 2013), model B requires a slightly more massive AGB companion of around $6 M_\odot$. It should be noted, however, that this mass requirement is not strict, in the sense that model B may still be viable with a lower total ejected mass during the AGB wind phase, i.e., with a shorter AGB wind phase prior to the explosion. In fact, for a bow shock distance of ~ 2 pc and a wind velocity of 10 km s^{-1} , the flow timescale is around 200 kyr. While this holds for the spherical wind case, in our simulations the wind bow shock structure reaches its approximate final size at around 400 kyr. Imposing the explosion at this time would decrease the total mass ejected by the wind to $4 M_\odot$, which is compatible with the AGB companion mass estimated by Chiotellis et al. (2012).

Our models do not include the so-called “ears”, a characteristic feature of Kepler’s SNR. Their apparently symmetrical position with respect to the center of the object suggests that an additional mechanism may be taking place. Tsebrenko & Soker (2013) recently explored the possibility that these protrusions, which resemble those that are

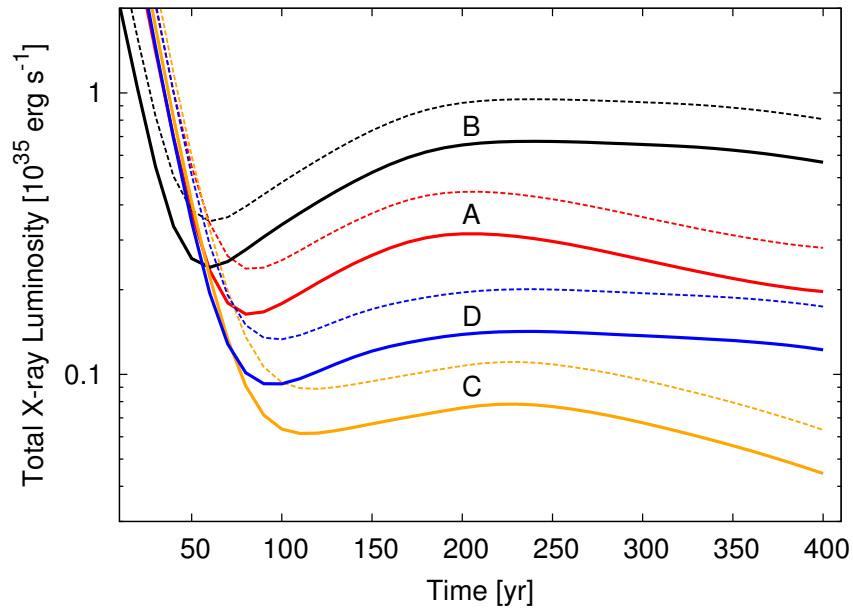


Figura 4.9: Time evolution of the total X-ray luminosity for the four models. The thick continuous lines correspond to emission coefficients computed using the metal enhancements of Kinugasa & Tsunemi (1999), while the thin dashed lines were obtained with a higher metallicity of $Z = 3$ solar (see text). The letter label between each pair of curves indicates the model.

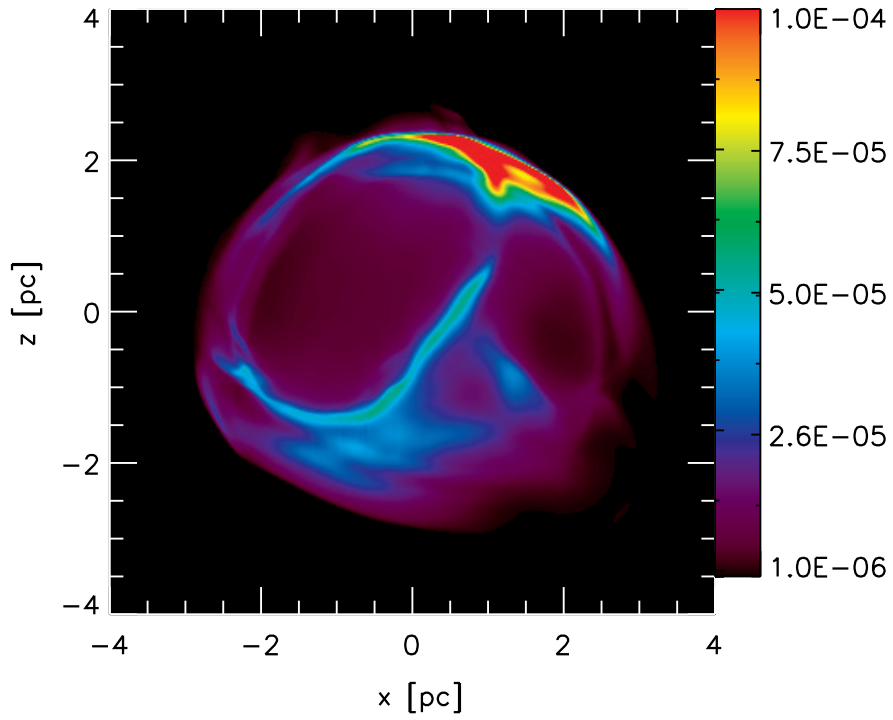


Figura 4.10: X-ray emission map corresponding to Model B for a rotation angle of 70° , represented with a color map and scale similar to the *Chandra* observation (compare to Fig. 4.1b). The color bar is given in units of $\text{erg s}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{sr}^{-1}$.

often seen in planetary nebulae, can be attributed to the effect of jets. They propose two scenarios: in the first, jets launched from the white dwarf’s accretion disk create opposing lobes on a shell of circumstellar material before the explosion, while in the second the jets are produced when the white dwarf merges with the core of the AGB companion shortly before the explosion. They find that both scenarios are capable of producing the “ears” of the remnant. While it is not clear whether their results extrapolate to the highly complex wind structure produced in our simulations, it will certainly be worth including these jets in our models in a future work.

While in this work we assumed a distance to Kepler’s SNR of ~ 5 kpc, Patnaude et al. (2012) showed that the amount of ^{56}Ni present in the shell suggests a distance $\gtrsim 7$ kpc. This $\sim 40\%$ increase on the distance to the remnant would accordingly scale the radius of the forward shock, and thus require the AGB wind bow shock structure in our models to be scaled up as well. One way to achieve this while keeping the same $\dot{M}$ and v_w for each model would be to lower the density n_0 of the ambient medium in our simulations by a factor ~ 2 (see eq. (4.1)). For instance, in Model B n_0 would have to be decreased to $5 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-3}$, which is still within the characteristic range of the hot ionized component of the ISM. The energy of the explosion would also have to be increased to $\gtrsim 1 \times 10^{51}$ erg, in agreement with the results of Patnaude et al. (2012). By keeping the same $\dot{M}$ and v_w we would expect the wind bubbles to be structurally similar to those in our current models, and thus the resulting X-ray morphologies to be similar as well. This change in scale would, however, probably increase the X-ray luminosity slightly, as the X-ray emitting region would have a larger volume. This could help achieve a greater agreement between the values obtained in our models and the observations.

4.6. Conclusions

In this work we have expanded on the previous numerical studies of Kepler’s SNR by performing fully 3D numerical simulations following the AGB wind scenario originally proposed by Bandiera (1987) and recently revisited in 2D simulations by Velázquez et al. (2006), Chiotellis et al. (2012) and Burkey et al. (2013).

In our 3D simulations, the progenitor of Kepler’s SNR is a binary system composed by an AGB star with a strong stellar wind and a mass-accreting white dwarf companion.

This scenario is consistent with the possible Type Ia nature of Kepler’s SN. Due to the system’s high peculiar velocity of around 280 km s^{-1} , the interaction of the AGB wind with the ISM produces a wind bubble surrounded by a bow shock.

Additionally, we have considered in our model that the AGB wind is anisotropic, introducing a latitude-dependence in both its terminal velocity and density profile, and have also tilted the polar axis of the AGB star with respect to the direction of motion of the system through the ISM. After the wind bubble is established, we then simulated the detonation of the white dwarf companion by injecting mass and energy into a spherical region, and let the remnant evolve to its present age.

We simulated four models, varying the values of the AGB wind mass-loss rate, terminal velocity and ISM density. The remnant reaches an approximate size of 2–3 pc, except along one of the polar directions in which it blows out of the wind bubble considerably. We obtain expansion parameters in the range 0.4 to 0.8 for the dense regions produced by the interaction of the supernova blastwave and termination shock of the precursor wind.

In order to compare with the observations, we computed synthetic X-ray emission maps, taking into account the estimated direction of motion of the progenitor system with respect to the line of sight and trying several 3D orientations of the simulation data. In all cases, we obtained complex asymmetric X-ray morphologies with a size that is consistent with the observations. Some of the models also exhibit an enhancement of the X-ray emission along parts of the limb, and models B and D also display a central bar-like feature for rotation angles around 90° .

We also calculated total X-ray luminosities and found that most models produce sub-luminous results with respect to observations, the closest to the observational results being model B, which reaches a luminosity lower than the observations by only a factor of two. Finally, we analyzed the time evolution of the luminosity and recover a decrease in recent decades that is consistent with the observations.

Based on its size, morphology and overall luminosity, we consider model B, for which $\dot{M} = 10^{-5} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, $v_{\text{pole}} = 10 \text{ km s}^{-1}$ and $n_0 = 10^{-3} \text{ g cm}^{-3}$, to be the model that most successfully explains the origin of Kepler’s SNR.

Acknowledgments

We thank an anonymous referee for insightful comments that improved this work. JCTR, PFV and AE acknowledge support from the CONACyT grants 101356, 101975, 167611, and UNAM DGAPA grant IN105312. EMR is partially supported by CONICET PIP 114-200801-00428. EMR is member of the Carrera del Investigador Científico of CONICET. We thank Enrique Palacios for maintaining the Diable cluster, where the simulations were performed. CHIANTI is a collaborative project involving George Mason University, the University of Michigan (USA) and the University of Cambridge (UK).

Bibliografía

Baade, W. 1943, ApJ, 97, 119

Bamba, A., Yamazaki, R., Yoshida, T., Terasawa, T., & Koyama, K. 2005, ApJ, 621, 793

Bandiera, R. 1987, ApJ, 319, 885

Bandiera, R., & van den Bergh, S. 1991, ApJ, 374, 186

Bieging, J. H., & Tafalla, M. 1993, AJ, 105, 576

Blair, W. P., Long, K. S., & Vancura, O. 1991, ApJ, 366, 484

Blair, W. P. 2005, 1604-2004: Supernovae as Cosmological Lighthouses, 342, 416

Blair, W. P., Ghavamian, P., Long, K. S., et al. 2007, ApJ, 662, 998

Borkowski, K. J., Sarazin, C. L., & Blondin, J. 1992, ApJ, 400, 222

Burkey, M. T., Reynolds, S. P., Borkowski, K. J., & Blondin, J. M., 2013, ApJ, 764, 63

Cassam-Chenaï, G., Decourchelle, A., Ballet, J., et al. 2004, A&A, 414, 545

Chiotellis, A., Schure, K. M., & Vink, J. 2012, A&A, 537, A139

Dalgarno, A., McCray, R. A. 1972, ARAA, 10, 375

Esquivel, A., Raga, A. C., Cantó, J., et al. 2010, ApJ, 725, 1466

DeLaney, T., Koralesky, B., Rudnick, L., & Dickel, J. R. 2002, ApJ, 580, 914

Dere, K. P., Landi, E., Mason, H. E., Monsignori Fossi, B. C., Young, P. R. 1997, A&AS, 125, 149

- Dickel, J. R., Sault, R., Arendt, R. G., Korista, K. T., & Matsui, Y. 1988, *ApJ*, 330, 254
- Gerardy, C. L., & Fesen, R. A. 2001, *AJ*, 121, 2781
- Green, A. J., Frail, D. A., Goss, W. M., & Otrupcek, R. 1997, *AJ*, 114, 2058
- Gruendl, R. A., Guerrero, M. A., Chu, Y.-H., & Williams, R. M. 2006, *ApJ*, 653, 339
- Harten, A., Lax, P. D., van Leer, B. 1983, *SIAM Rev.*, 25, 357
- Hughes, J. 1999, *ApJ*, 527, 298
- Jun, B.-I., & Norman, M. L. 1996, *ApJ*, 465, 800
- Karakas, A., & Lattanzio, J. C. 2007, *PASA*, 24, 103
- Kinugasa, K., & Tsunemi, H. 1999, *PASJ*, 51, 239
- Landi, E., Del Zanna, G., Young, P. R., et al. 2006, *A&AS*, 162, 26
- Lucas, R., Guélin, M., Kahane, C., Audinos, P., & Cernicharo, J. 1995, *APSS*, 224, 293
- McKee, C. F., & Ostriker, J. P. 1977, *ApJ*, 218, 148
- Mellema, G. 1995, *MNRAS*, 277, 173
- Morgan, H. L., Dunne, L., Eales, S. A., Ivison, R. J., & Edmunds, M. G. 2003, *ApJL*, 597, L33
- Park, S., Badenes, C., Mori, K., et al. 2013, *ApJL*, 767, L10
- Patnaude, D. J., Badenes, C., Park, S., & Laming, J. M. 2012, *ApJ*, 756, 6
- Predehl, P., & Schmitt, J. H. M. M. 1995, *A&A*, 293, 889
- Raga, A. C., Cantó, J., De Colle, F., et al. 2008, *ApJ*, 680, L45
- Reynolds, S. P., Borkowski, K. J., Hwang, U., et al. 2007, *ApJL*, 668, L135
- Reynoso, E. M., & Goss, W. M. 1999, *AJ*, 118, 926
- Sankrit, R., Blair, W. P., Frattare, L. M., et al. 2008, *AJ*, 135, 538
- Soker, N., Kashi, A., Garcá-Berro, E., Torres, S., & Camacho, J. 2013, *MNRAS*, 431, 1541

- Sollerman, J., Ghavamian, P., Lundqvist, P., & Smith, R. C. 2003, *A&A*, 407, 249
- Tsebrenko, D., & Soker, N. 2013, *MNRAS*, 435, 320
- Toledo-Roy, J. C., Velázquez, P. F., de Colle, F., et al. 2009, *MNRAS*, 395, 351
- Toledo-Roy, J. C., Velázquez, P. F., Esquivel, A., & Giacani, E. 2013, *MNRAS*, 2600
- Toro, E. F., Spruces, M., Speares, W. 1994, *Shock Waves*, 4, 25
- Velázquez, P. F., Vigh, C. D., Reynoso, E. M., Gómez, D. O., & Schneider, E. M. 2006, *ApJ*, 649, 779
- van den Bergh, S., & Kamper, K. W. 1977, *ApJ*, 218, 617
- Vassiliadis, E., & Wood, P. R. 1993, *ApJ*, 413, 641
- Vink, J. 2008, *ApJ*, 689, 231
- White, R. L., & Long, K. S. 1983, *ApJ*, 264, 196

Capítulo 5

Conclusiones

El objetivo del presente trabajo fue el estudio numérico de remanentes de supernova, enfocándose principalmente en remanentes que presentan asimetrías. Con el fin de validar el resultado de simulaciones numéricas, se comenzó por estudiar modelos analíticos de evolución de RSNs. Aplicando estos modelos se comenzó realizando simulaciones numéricas en 2D empleando un código pre-existente. Para poder atacar una gama más amplia de problemas, se planteó como un objetivo principal de la tesis el desarrollo de un nuevo código 3D de malla adaptiva y paralelo. Con esta poderosa herramienta se pueden explorar modelos de RSNs mucho más complejos pues el tratamiento plenamente 3D elimina la necesidad de imponer limitaciones de simetría. Este código se usó ya para el estudio de dos RSNs asimétricos específicos, G352.7-0.1 y el remanente de Kepler. A continuación se dará brevemente un resumen de los logros obtenidos en cada uno de estos aspectos.

Se comenzó por estudiar los modelos analíticos canónicos de la evolución de RSNs, los cuales fueron establecidos en trabajos pioneros de Sedov, Taylor y, más tarde, Chevalier, Truelove y McKee, entre muchos otros. Uno de los objetivos principales fue establecer restricciones que pudiesen conectar los resultados numéricos con los observacionales. Un ejemplo es el resultado de que, debido a la autosimilaridad de la solución analítica de la fase Sedov-Taylor, es posible conectar el radio y velocidad de expansión de un remanente, cantidades que son observacionalmente determinables, con la densidad del medio ambiente (cuyo valor puede estimarse en muchas ocasiones) y la energía inicial de la explosión. Se encontró que esta conexión se mantiene incluso después de la transición a la fase en la que las pérdidas radiativas se vuelven importantes. Las expresiones analíticas derivadas de este

modelo sirvieron de base amplia de comparación para validar los resultados numéricos.

El trabajo de doctorado estuvo fundamentado parcialmente en la experiencia obtenida a partir del estudio numérico del remanente asimétrico DEM L316, el cual se publicó en 2009 (Toledo-Roy et al. 2009). En este trabajo, se empleó el código hidrodinámico 2D MEXCALC para modelar este remanente de doble cáscara como el resultado de la interacción de dos explosiones cercanas. El marco teórico de evolución se empleó para restringir los parámetros del modelo empleando las observaciones y estudios cinemáticos disponibles en la literatura. Se encontró que la emisión de rayos X térmica observada no es consistente con una colisión entre las cáscaras, por lo que se concluyó que los remanentes no deben estar actualmente en interacción.

También se usó el código MEXCALC para estudiar la interacción de dos RSNs de manera general, tratando de determinar el tipo de cavidad producida en función de la fase evolutiva en la cual se encuentran los remanentes al momento de la colisión. Se encontró que se produce una cavidad continua cuando los remanentes se encuentran en la fase Sedov-Taylor, lo cual podría explicar la formación de túneles en el medio interestelar, y que la cáscara delgada y densa característica de la fase radiativa crea una pared que separa el interior de los remanentes impidiendo que se mezclen. Esto confirma los resultados anteriores de Ikeuchi (1978) y valida la metodología de simulación de RSNs para estudios futuros.

Una de las partes centrales del proyecto de doctorado fue el desarrollo del código hidrodinámico tridimensional WALICXE3D. El poder realizar simulaciones en 3D permite relajar las restricciones de simetría que deben imponerse a modelos 2D, lo cual es ideal para el estudio de asimetrías en RSNs. Mucho de la filosofía de diseño deriva de su antecesor, el código 2D WALICXE desarrollado por Alejandro Esquivel.

WALICXE3D es un código paralelizado de malla adaptiva, lo cual permite estudiar problemas astrofísicos con resoluciones espaciales mucho mayores que un código de malla fija. La malla adaptiva funciona a base de bloques, los cuales son unidades de datos que pueden subdividirse de manera adaptiva para producir una mayor resolución en las zonas de interés, o bien, combinarse con bloques vecinos cuando se puede resolver una zona con baja resolución.

Por otro lado, la paralelización, la cual fue implementada mediante la librería MPI, permite aprovechar las herramientas de supercómputo actuales y resolver problemas com-

plejos en una fracción del tiempo que se necesitaría con un código no-paralelo.

El código resuelve las ecuaciones de Euler de la hidrodinámica invíscida mediante el método de volúmenes finitos de Godunov a segundo orden, combinado con el robusto *Riemann solver* HLL y su modificación HLLC. También se incluye en la solución numérica un tratamiento simple que permite incluir el efecto del enfriamiento radiativo en la dinámica del gas, lo cual es un aspecto importante en la evolución de RSNs de edad intermedia.

Se verificó el correcto desempeño de los algoritmos numéricos individuales mediante la simulación de tubos de choque en 1D, los cuales tienen solución analítica. Para validar el desempeño del código completo en 3D, se realizaron pruebas que consistieron en comprobar la correcta evolución de una explosión puntual, según la solución analítica de Sedov. También se estudiaron aspectos técnicos de desempeño como el escalamiento paralelo y se obtuvieron resultados satisfactorios.

Como parte central del proyecto, WALICXE3D se empleó para estudiar dos RSNs asimétricos.

El primero fue un estudio del remanente Galático G352.7-0.1, el cual fue ya aceptado para publicación en *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* (A blowout numerical model for the supernova remnant G352.7-0.1, por Toledo-Roy et al., 2013). Este remanente es peculiar pues muestra múltiples cáscaras en longitudes de onda de radio así como emisión centralizada en rayos X. Se modeló este RSN como el producto de una explosión única cerca del borde de una nube cuya densidad es más alta que la del medio ambiente circundante. Para poder comparar las simulaciones con las imágenes de radio, se modificó WALICXE3D añadiendo la ecuación de inducción a las ecuaciones hidrodinámicas y advectando un campo magnético “pasivo” junto con el fluido. Este tratamiento se justifica ya que el campo magnético no es dinámicamente importante, y se evita de esta manera la necesidad de un tratamiento MHD completo.

Usando los resultados de las simulaciones hidrodinámicas, incluyendo la información del campo magnético, se calcularon mapas sintéticos de emisión sincrotrón en radio. Puesto que actualmente se debate aún cuál es el mecanismo más eficiente en la producción de emisión sincrotrón en choques de RSNs, se calcularon los mapas siguiendo los dos paradigmas dominantes.

Se encontró que es posible obtener múltiples cáscaras en radio a través de este modelo numérico, sujeto a la orientación del objeto con respecto a la línea de visión. Sin embargo,

no se logró dar evidencia a favor o en contra de alguno de los mecanismos de producción de emisión sincrotrón en remanentes de supernova.

Por otro lado, el modelo reproduce correctamente la morfología de centro lleno en rayos X, lo cual es consistente con la edad estimada del remanente. Es notorio que se obtiene este resultado aún sin la inclusión de la conducción térmica en el código.

El segundo remanente asimétrico que se estudió fue el remanente de Kepler, el cual es famoso pues es producto de la supernova observada por Johannes Kepler en 1604. Este trabajo se encuentra ya completo y ha sido enviado para su publicación en MNRAS.

El origen de este remanente ha sido difícil de explicar, pues por un lado la abundancia de nitrógeno en la cáscara del remanente sugiere que es producto de la explosión de una estrella masiva, mientras que el espectro de rayos X muestra emisión de Fe y relativamente poca emisión de oxígeno, lo cual es indicador de una explosión de tipo Ia. Para modelar este remanente, se retomó la propuesta de que el sistema progenitor era un sistema binario *runaway*, compuesto por una estrella en fase AGB y una enana blanca que acreta material de la primera. Debido a su alta velocidad con respecto al medio interestelar de 280 km s^{-1} , el viento de la estrella AGB produce una estructura con un choque a proa. La enana blanca explota entonces en la burbuja producida por el viento de su compañera. Este modelo permite reconciliar la idea de que el medio ambiente fue previamente moldeado por el viento de una estrella evolucionada con el probable origen de tipo Ia.

En nuestro modelo aprovechamos las capacidades 3D de WALICXE3D para introducir el elemento adicional de que el viento de la estrella AGB es anisotrópico (lo cual parece ser el caso en muchos vientos AGB observados). Esto se hizo considerando que las propiedades del viento, tales como la velocidad terminal y la densidad, varían en función de la latitud. Además, permitimos que el eje polar de la estrella tuviera una inclinación con respecto a la dirección de movimiento del sistema a través del medio interestelar.

Se analizaron cuatro modelos con distintos valores para la tasa de pérdida de masa del viento, la velocidad terminal del viento y la densidad del medio ambiente. En cada uno, primero se simuló la formación de la burbuja del viento AGB, y posteriormente se siguió la expansión del RSN, asegurando que la forma en que se impone el material eyectado por la explosión sea consistente con una explosión de tipo Ia. Se obtuvo que la interacción del viento AGB con el medio ambiente produce una compleja estructura que es susceptible a la inestabilidad Kelvin-Helmholtz, por lo cual la burbuja en la cual se expande inicialmente

el remanente es altamente asimétrica.

Los mapas de rayos X sintéticos producidos empleando los resultados numéricos muestran una estructura que en algunos de los modelos es cualitativamente similar a la observada, reproduciendo tanto el aumento de brillo en la zona noroeste del remanente, como una barra transversal que lo cruza aproximadamente de norte a sur. Aunque la luminosidad total en rayos X resulta más baja que la observada en los modelos, en el más exitoso esta cifra está solamente un factor dos por debajo del valor observado.

Los modelos numéricos también reproducen otras características observadas, como el diámetro del RSN (si se considera una distancia de 5 kpc) y los valores atípicos del parámetro de expansión en algunas zonas del remanente. Finalmente, la evolución temporal de la luminosidad obtenida también coincide aproximadamente con la tasa de decaimiento observada en décadas recientes.

Con estos dos estudios numéricos se pretende haber contribuido al entendimiento del origen de las asimetrías en estos remanentes de supernova. Además, los trabajos sostienen la utilidad y buen funcionamiento del código WALICXE3D y lo consolidan como una herramienta computacional que podrá ser utilizada en el futuro para el estudio de una gran variedad de problemas astrofísicos.

Apéndice A

El remanente de doble cáscara DEM L316

J. C. Toledo-Roy, P. F. Velázquez, F. De Colle, R. F. González, E. M. Reynoso, S. E. Kurtz and J. Reyes-Iturbide

En este apéndice se incluye el estudio del RSN con apariencia de doble cáscara DEM L316, el cual brindó la experiencia que sirvió como fundamento para el proyecto de doctorado. Este trabajo se publicó en *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* (Toledo-Roy et al. 2009).

A.1. Introducción

El RSN DEM L316 (ver Figura A.1), ubicado en la Gran Nube de Magallanes a unos ~ 50 kpc de distancia, fue inicialmente identificado como un RSN por Mathewson & Clarke (1973) por su alta proporción de [S II] a $H\alpha$. Desde las primeras observaciones este RSN se distinguió por la peculiar apariencia de doble cáscara: una cáscara pequeña hacia el noreste (de aquí en adelante, *Cáscara A*) y una más grande situada hacia el suroeste (*Cáscara B*).

Varios autores han estudiado este remanente en varias longitudes de onda, siendo quizás el más notorio el trabajo de Williams et al. (1997). Este es un estudio muy completo en varias longitudes de onda: imágenes en óptico ($H\alpha$, [S II], [O III], continuo en azul y en rojo,

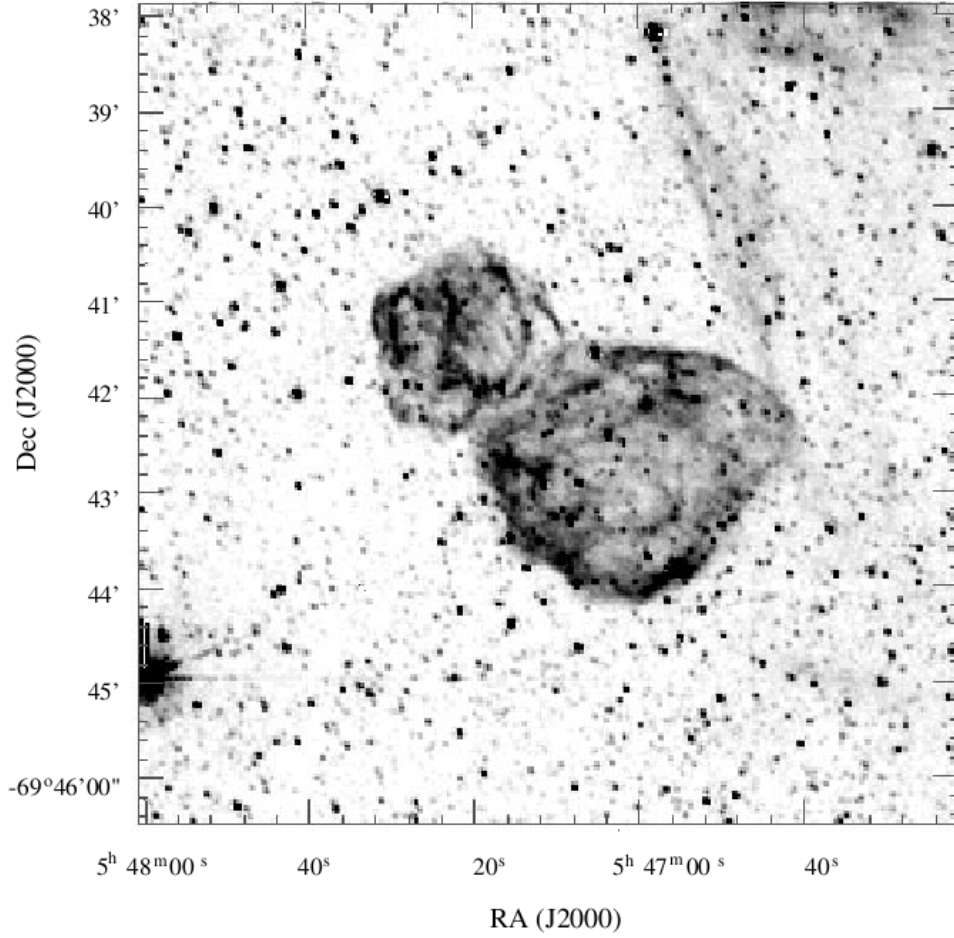


Figura A.1: Imagen en $H\alpha$ de DEM L316; Figura 1a de Williams et al. (1997).

obtenidos con el telescopio Curtis Schmidt del Cerro Tololo Inter-American Observatory), espectro Échelle de $H\alpha$ ($\lambda_c = 6563 \text{ \AA}$, $\Delta\lambda = 75 \text{ \AA}$; Cerro Tololo también), rayos X del ROSAT en la banda $0.1 - 2.4 \text{ keV}$, y observaciones en radio a 5, 7 y 13 cm por medio del radiotelescopio ATCA.

Williams et al. (1997) explora la posibilidad de que DEM L316 sea de hecho dos RSNs en colisión física. Un evento de esta categoría sería de gran interés al estudio de la evolución de los RSNs en general, la transferencia de energía de los RSNs al medio interestelar y el comportamiento del gas caliente en las cavidades producidas por su expansión. Ikeuchi (1978) y Jones et al. (1979) sugieren basándose en estudios numéricos que la colisión podría “rejuvenecer” al remanente más viejo debido a que la interacción podría mantener la presión interna por encima de la del medio ambiente por más tiempo. Además, se espera que la colisión entre dos remanente conlleve a la formación de un túnel entre las

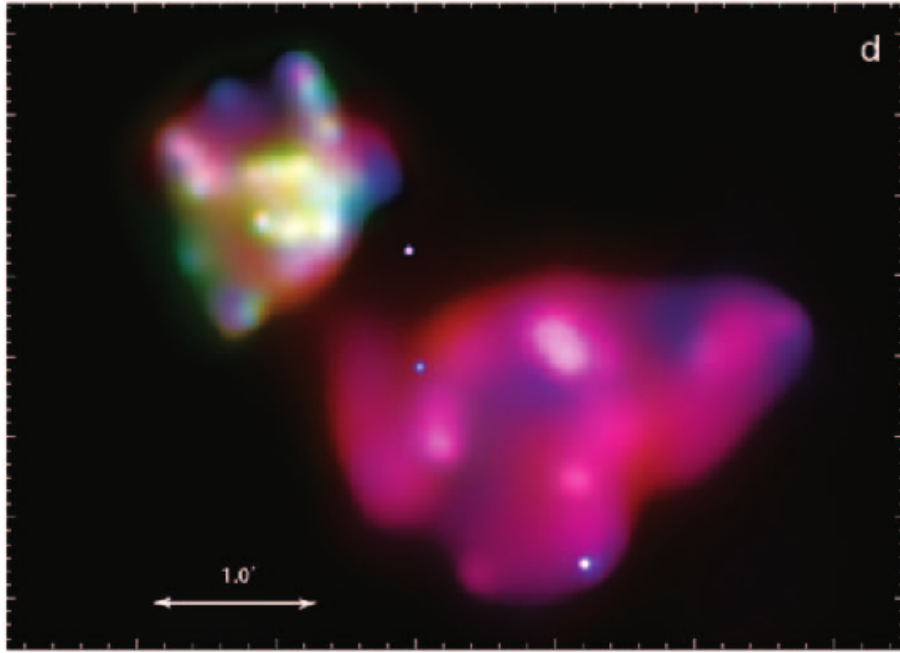


Figura A.2: Imagen de Chandra de DEM L316 en tres bandas 0.3–0.8 keV (rojo), 0.8–1.5 keV (verde), y 1.5–8 keV (azul); Figura 2d de Williams et al. (2005).

dos cavidades calientes (como se discutió en la sección 1.3.4).

Se han propuesto varios escenarios para explicar la morfología de doble cáscara de este objeto. Una posibilidad es que este remanente es producto de una explosión única la cual ocurre en el interior de una nube densa más delgada en una dirección que en otra. El remanente alcanzaría el borde esta nube en una dirección antes que en otras, produciendo dos protuberancias a lo largo de esta dirección. Si fuese el caso, a menos que esta dirección fuese perpendicular a la línea de visión, se esperaría que las cáscaras presenten velocidades radiales distintas en sus extremos, pero Williams et al. (1997) mostraron que ambas cáscaras tienen velocidades de expansión similares que parecen converger a 245 km s^{-1} .

En otra alternativa, sugerida inicialmente por Mathewson & Clarke (1973), los dos remanentes son de hecho el producto de eventos de supernova distintos y que se hayan separados físicamente en el espacio. La apariencia de doble cáscara sería meramente una superposición a lo largo de la línea de visión. Sin embargo, Williams et al. (1997) citan el incremento en emisión de [O III] en la coyuntura entre las cáscaras, la similitud de las velocidades heliocéntricas y la estructura del campo magnético en la zona aparentemente superpuesta para apoyar la idea de que los dos RSNs estén en colisión física.

Nishiuchi et al. (2001) estudiaron esta fuente con datos de *ASCA* y *ROSAT*, y mostra-

ron que las cáscaras son espectralmente distintas, teniendo la cáscara pequeña (al noreste) una abundancia de hierro mucho más alta que la cáscara grande. Esto, junto con resultados en rayos X expandidos en Williams et al. (2005) basados en las razones O/Fe y Ne/Fe, sugieren fuertemente que la cáscara pequeña proviene de una explosión de supernova Tipo Ia mientras que la cáscara grande es consistente con un origen de Tipo II. Esto arroja evidencia importante, aunque aún no concluyente, en la dirección que los remanentes DEM L316 no son parte de un único SNR bipolar, sino que fueron originados por explosiones separadas. Nishiuchi et al. (2001) argumentan que el origen radicalmente distinto de los dos RSNs haría una colisión entre ellos muy improbable debido a las escalas de tiempo evolutivas que requieren las estrellas progenitoras de estos dos tipos de supernova para llegar a explotar.

El estudio realizado por Williams et al. (2005) en rayos X (ver Figura A.2), usando datos de *Chandra* y *XMM-Newton* y expandiendo la banda hasta 8.0 keV, confirman la diferencia espectral entre las dos cáscaras: abundancia de Fe de 1.7 ± 2 solar para la cáscara pequeña contrastando con $0.16 \sim 0.4$ solar para la grande. Por otro lado, la estructura en rayos X de la cáscara pequeña no presenta ningún aumento de brillo hacia el borde de la cáscara, lo cual está en contraste marcado con la apariencia de cáscara en radio y óptico; esto pondría este remanente en la clasificación de morfología mixta (Williams et al. 2005). Se sugiere de nuevo que esto podría ser resultado de la conducción térmica y quizás mezclado turbulento en el interior de la cáscara. También, las propiedades físicas del gas caliente parecen típicas de RSNs de edad mediana para ambas cáscaras. Con respecto a la hipótesis de colisión, se revisa la sugerencia previa y se enfatiza que una colisión entre remanentes originados por explosiones Tipo Ia y Tipo II es poco probable.

A.2. Modelo Numérico

Para investigar la posibilidad de que DEM L316 sea un sistema compuesto por dos RSNs en interacción física, y también para cuantificar el impacto de la conducción térmica, se emplearon los métodos descritos anteriormente para explorar dos escenarios distintos, los cuales se encuentran esquematizados en la Figura A.3.

En el primer escenario, el cual llamamos el *caso con colisión*, los sitios de las dos explosiones de supernova se escogieron de tal manera que la configuración final de los

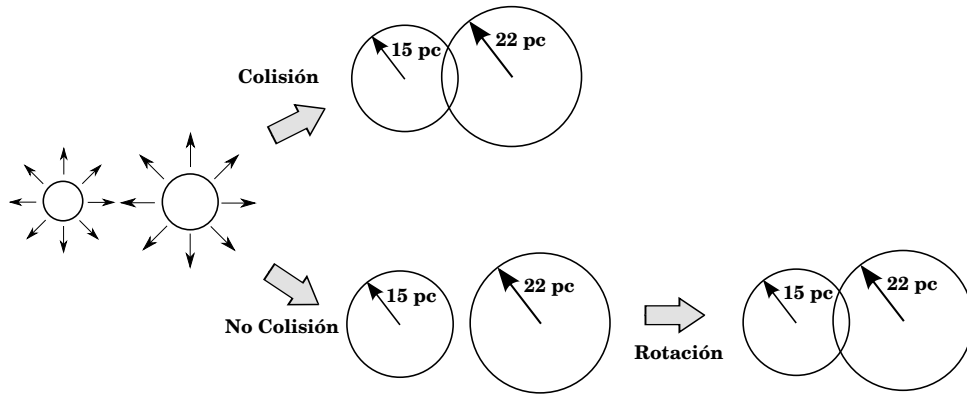


Figura A.3: Esquema de los dos escenarios que se exploraron para modelar DEM L316 a través de dos explosiones independientes.

remanentes coincida con las dos cáscaras observadas. En este escenario, los dos remanentes colisionan un poco antes del tiempo final de integración, produciendo entre ellos una región estrecha de material que interactúa. Ajustamos las condiciones iniciales de este caso de tal forma que esta región tenga un ancho que coincide aproximadamente con la superposición de las cáscaras en las observaciones.

El segundo escenario, el cual denominamos el *caso sin colisión*, supone que las cáscaras no interactúan físicamente, sino que se encuentran separadas por una distancia corta al tiempo final de integración. Para recuperar la superposición observada, proyectamos la caja computacional sobre el plano de cielo con una rotación de 32° . Esto produce una imagen final en rayos X en la cual los remanentes tienen la misma apariencia (en términos de separación de los centros y superposición de los bordes) que en el caso con colisión.

Podemos estimar la energía de las explosiones directamente de los tamaños observacionales, los cuales son de 15 y 22 pc para las cáscaras A y B, respectivamente, y de la velocidad de expansión, la cual es de 220 km s^{-1} para ambas cáscaras (Williams et al. 1997). Empleando la ec. (1.25), y suponiendo una densidad del medio ambiente de $n_0 = 0.5 \text{ cm}^{-3}$, se obtiene que $E_{51} = 0.19$ y 0.61 para las Cáscaras A y B, respectivamente. Con estas energías, la edad calculada de los remanentes en nuestro modelo resulta en 24400 años para la Cáscara A y 35800 años para la Cáscara B. Calculando la edad de transición a la fase radiativa, ec. (1.16), obtenemos 20600 y 30300 años, respectivamente. Esto indica que ambos remanentes están ya entrando a la fase radiativa. Estas edades aproximadas coinciden razonablemente con las estimaciones de Williams et al. (1997) y Nishiuchi et al. (2001).

Las simulaciones fueron realizadas con el código 2D axisimétrico MEXCALC en una malla uniforme de 1000×2000 celdas. El dominio computacional tiene una extensión de 1.5×10^{20} cm en la dirección r y de 3.0×10^{20} cm en la dirección z , lo cual produce una resolución espacial de 1.5×10^{17} cm en ambos ejes.

El dominio computacional se llenó inicialmente con un medio gaseoso uniforme y en reposo de densidad 0.5 cm^{-3} , masa atómica promedio por partícula de 1.3 amu y temperatura 10^3 K. Estas condiciones son representativas del medio interestelar de la Gran Nube de Magallanes.

A $t = 0$, la primera explosión de supernova (correspondiente a la Cáscara B) fue impuesta al inyectar la energía de 6.1×10^{50} erg en una región semicircular de radio 6×10^{18} cm y masa total $3.0 M_{\odot}$ centrada en un punto sobre el eje z con coordenadas $z = 1.88 \times 10^{20}$ cm para el caso con colisión y $z = 2 \times 10^{20}$ para el caso sin colisión. La energía total fue distribuida en el gas incrementando la presión térmica y la energía cinética, como se describió en la sección 1.3.1. Recordamos que el detalle de esta distribución de energía no es importante pues ambos remanentes son evolucionados.

La segunda supernova (que corresponde a la Cáscara A en nuestro modelo) se detonó cuando $t = 3.59 \times 10^{11}$ s, es decir, 11400 años después del inicio de la simulación. La explosión está centrada en $z = 8.6 \times 10^{19}$ cm en ambos escenarios de colisión. La región fue inyectada con $1.4 M_{\odot}$ y una energía total de 1.0×10^{50} erg. Los demás detalles fueron idénticos que para la Cáscara B.

Para poder comparar las simulaciones con las observaciones, empleamos los resultados numéricos para calcular mapas sintéticos de emisión de rayos X. Para lograr esto, supusimos que el gas caliente se encuentra en equilibrio coronal (Landini & Fossi 1991; Mazzotta et al. 1998), y adoptamos la abundancia típica de la Gran Nube de Magallanes ($Z = 0.3$ veces la solar). Integramos entonces el coeficiente de emisión de rayos X para este régimen, $j_{\nu} = n^2 \xi(T)$, en el rango $0.3 - 8$ keV, donde n es la densidad numérica y $\xi(T)$ es una función de temperatura que generamos para este rango de energías usando el paquete CHIANTI (Dere et al. 1997; Landi et al. 2006). En el caso particular de la Cáscara A, se incrementó la abundancia de hierro usada en el cálculo a $\text{Fe}/\text{Fe}_{\odot} = 1.4$, de forma a reproducir la metalicidad observada de esta cáscara. En estos cálculos hemos incluido también el efecto de la absorción interestelar, tomando una densidad columnar de $N_H = 3 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2}$, obtenida por Williams & Chu (2005) usando datos de *Chandra*.

A.3. Resultados

A continuación se describen los resultados de cuatro modelos: los modelos M1 y M2 corresponden al caso con colisión, mientras que los modelos M3 y M4 corresponden al caso sin colisión; en los modelos M2 y M4 se incluyó conducción térmica en la simulación (referirse a la Tabla A.1).

Los mapas de densidad de las Figuras A.4 y A.5 muestran la morfología final de los remanentes. El choque principal se distingue claramente como una cáscara delgada de material. Los radios de los remanentes en estos mapas son de 15.0 pc para la cáscara A y de 21.8 pc para la Cáscara B, lo cual concuerda estrechamente con nuestras predicciones y con las observaciones de Williams et al. (1997). Se calculó la velocidad de expansión de las cáscaras comparando los resultados numéricos de dos tiempos cercanos. Se encontró que las velocidades son del orden de 230 km s^{-1} , similares a las obtenidas a partir de observaciones de H α . La evolución de los radios de los remanentes también coincide con lo predicho por el modelo analítico.

En estos mapas se puede apreciar claramente el efecto que tiene la conducción térmica sobre la estructura interior de los remanentes. Cuando no se incluye la conducción térmica (paneles superiores de las Figuras A.4 y A.5), la densidad numérica en el interior del remanente desciende por debajo de $1.5 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-3}$, mientras que cuando la conducción está presente la densidad solamente desciende a 0.1 cm^{-3} . Esto puede entenderse al reconocer que el transporte de energía térmica desde el gas caliente del interior hacia afuera se lleva a cabo normalmente mediante el movimiento del gas. Cuando la conducción térmica

Modelo	Escenario		Luminosidad rayos X	
	Col.	Cond.	Cásc. A	Cásc. B
M1	Sí	No	1.35	4.14
M2	Sí	Sí	1.53	4.52
M3	No	No	1.05	3.14
M4	No	Sí	1.17	3.54
Observado	-	-	3 ± 2	3

Tabla A.1: Las primeras tres columnas identifican los tres modelos, indicando si los remanentes colisionan (*Col.*) y si el código incluye la conducción térmica (*Cond.*). Las últimas dos columnas indican las luminosidades totales en rayos X, en unidades de $10^{35} \text{ erg s}^{-1}$. La luminosidad de la Cáscara A se calculó con una abundancia de Fe más alta, como se explica en el texto. La fila inferior indica los valores de luminosidad obtenidos por Williams & Chu (2005).

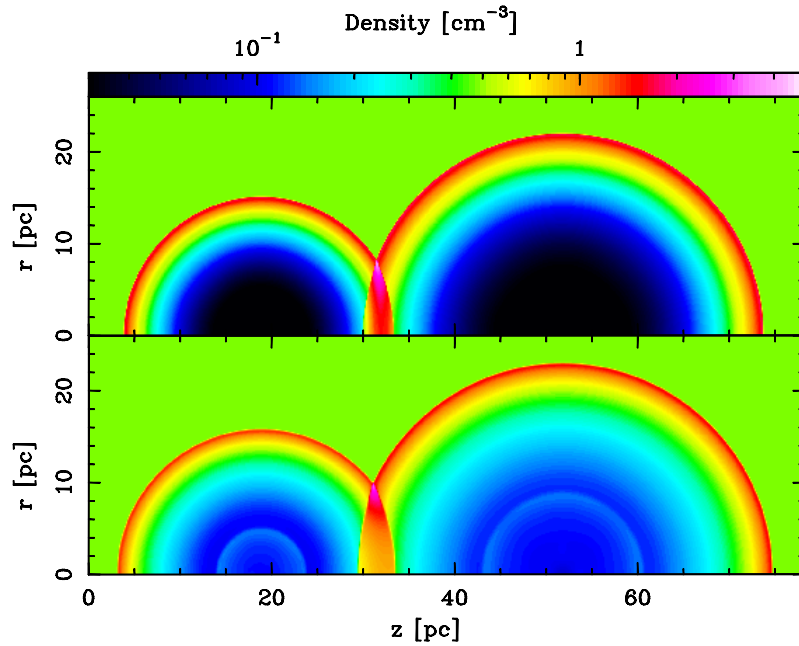


Figura A.4: Mapas de densidad simulada para el caso *con colisión*, sin conducción térmica (panel superior) y con conducción térmica (panel inferior). La región de interacción entre los dos remanentes se puede ver cerca de $z=31$ pc, y tiene un grosor de ~ 4 pc. Se ve claramente que el efecto principal de la conducción térmica es mantener una densidad más alta en el interior del remanente.

se incluye, parte de esta energía puede ser transportada sin movimiento del fluido, y esto permite que la presión térmica del interior disminuya manteniendo una densidad más alta.

Es importante mencionar que la presencia de campo magnético restringe el flujo de calor promovido por la conducción térmica a lo largo de las líneas de campo magnético, lo cual tiene como resultado suprimir el efecto global de la conducción sobre la evolución y luminosidad del remanente. Aún no existe un consenso sobre la importancia de esta cuestión. Malyskin (2001) y Narayan & Medvedev (2001) estudiaron el comportamiento de la conducción térmica en campos magnéticos desordenados y concluyeron que la conducción térmica no es nunca suprimida del todo.

En este trabajo, hemos explorado dos posibilidades extremas: por un lado, conducción completamente isotrópica (en la ausencia de campo magnético), y por otro, la ausencia de conducción térmica. Hay que recalcar que el campo magnético observado en la cercanía de DEM L316 es del orden de $20 \mu\text{G}$ (Williams et al. 1997). Este campo magnético no es suficientemente intenso como para alterar la evolución hidrodinámica de los remanentes, ya que la presión magnética, $B^2/8\pi \sim 10^{-11} \text{ dyn cm}^{-2}$ es bastante inferior a la presión

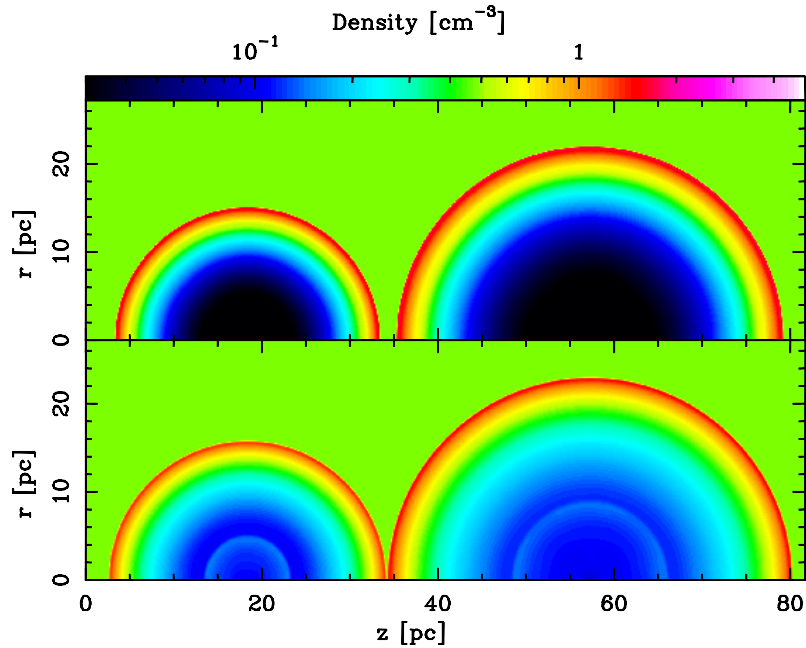


Figura A.5: Mapas de densidad simulada para el caso *sin colisión*, sin conducción térmica (panel superior) y con conducción térmica (panel inferior). La escala es la misma que la usada en la Figura A.4.

dinámica del gas, $\rho v^{-2} \sim 10^{-9} \text{ dyn cm}^{-2}$.

En las Figuras A.6 y A.7 se muestran mapas de emisión sintética de rayos X. La característica principal de los mapas en el caso con colisión (Figura A.6) es la brillante emisión proveniente de la zona de interacción entre los RSNs. El flujo de rayos-X en esta región alcanza valores de $10^{-6} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$. Compárese esto a los valores obtenidos para el resto de la Cáscara B (la más brillante de las dos), los cuales van desde $5 \times 10^{-8} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$ en el centro hasta $2 \times 10^{-8} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$ en el borde. La intensa emisión en la zona de interacción se debe a la reflexión de las ondas de choque de los remanentes, lo cual tiene el efecto de aumentar la densidad a valores entre 3 y 4 cm^{-3} . Una comparación de los paneles superior e inferior de la Figura A.6 revela que este rasgo brillante en rayos X es independiente de la presencia de la conducción térmica.

Para el caso sin colisión (Figura A.7), existe un leve aumento del flujo de rayos X en la región entre las cáscaras, la cual se debe a la superposición de los bordes causada por la proyección sobre el plano del cielo. El flujo obtenido en esta región es de $4 \times 10^{-8} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ sr}^{-1}$, el cual es del mismo orden de magnitud que el flujo en otras partes del remanente. Se observa que el flujo en la región entre los remanentes es dos

órdenes de magnitud más alta en el caso con colisión. La falta de una fuerte emisión de rayos X en la región de aparente contacto entre las cáscaras es consistente con las observaciones de *Chandra* y *ROSAT* (comparar la Figura A.2, una imagen de rayos X de *Chandra*, con la Figura A.6), lo cual favorece el caso sin colisión.

Por otro lado, el efecto de la conducción térmica sobre la emisión de rayos X es claramente visible en interior de las cáscaras. Solamente cuando se incluye la conducción térmica se recupera la morfología centralmente brillante observada. Esto apoya fuertemente el resultado de Tilley, Balsara & Howk (2006) de que la conducción térmica afecta profundamente la morfología en rayos X de los RSNs en la fase radiativa temprana. Tales remanentes se encuentran clasificados en la categoría de compuestos térmicos, de la cual DEM L316 se ha identificado como miembro. Esto concuerda con resultados de trabajos analíticos (Cox et al. 1999) y numéricos (Shelton et al. 1999; Velázquez et al. 2004).

Para comparar las simulaciones con las observaciones de forma cuantitativa, se calculó también la luminosidad total de ambas cáscaras sin incluir la absorción. Los resultados para los cuatro modelos se presentan en las últimas dos columnas de la Tabla A.1. Las luminosidades obtenidas concuerdan aproximadamente con las obtenidas por Williams & Chu (2005), $3 \pm 2 \times 10^{35}$ erg s⁻¹ para la Cáscara A y 3×10^{35} erg s⁻¹ para la Cáscara B.

Si se observa la luminosidad obtenida en los modelos M1 y M2, por ejemplo, se ve que incluir conducción térmica en las simulaciones numéricas tiene el efecto de aumentar la luminosidad en un 30 %, aproximadamente. Esto fue predicho por Velázquez et al. (2004), y puede ser explicado al considerar que el coeficiente de emisión depende del cuadrado de la densidad del gas, y que, como se vio, el efecto de la conducción térmica es mantener una densidad interior más alta. También vale mencionar que el efecto de incluir en una abundancia de Fe mayor para el cálculo de la luminosidad de la Cáscara A produce solamente un pequeño aumento del orden de 1 – 3 % con respecto al valor obtenido empleando la metalicidad $Z = 0.3$ solar.

A.4. Conclusiones

Llevamos a cabo simulaciones hidrodinámicas axisimétricas para reproducir la morfología física y en rayos X del RSN de doble cáscara DEM L316. Modelamos este objeto como dos remanentes que se expanden en proximidad física, y analizamos cuatro modelos

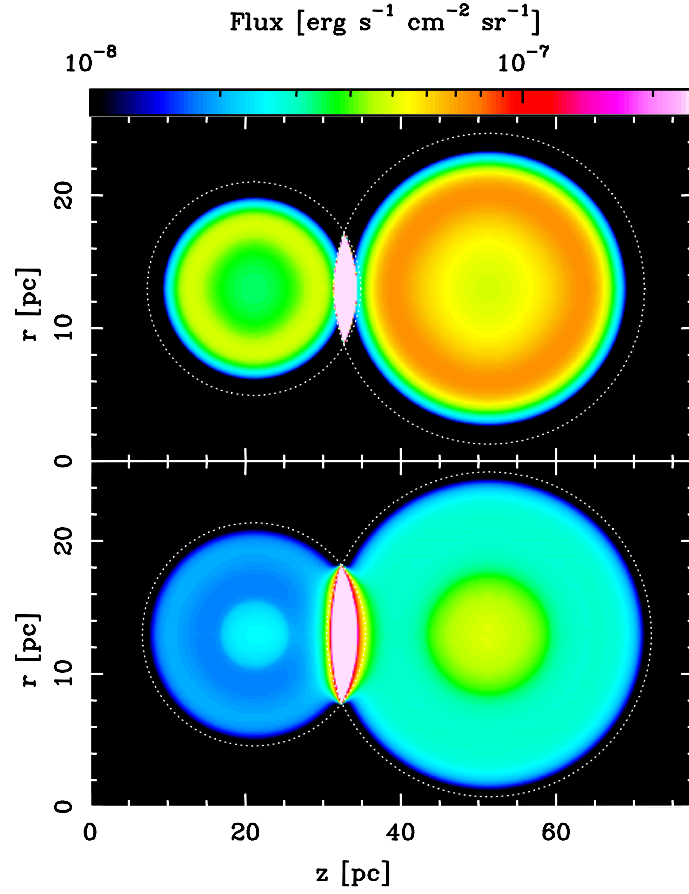


Figura A.6: Emisión de rayos X simulada para el caso *con colisión*, sin conducción térmica (panel superior) y con conducción térmica (panel inferior). La región de interacción en $z = 31$ pc muestra un fuerte aumento en la emisión de rayos X. Los remanentes presentan una morfología con emisión centralizada cuando se incluye la conducción térmica. Los círculos punteados indican la posición del choque principal.

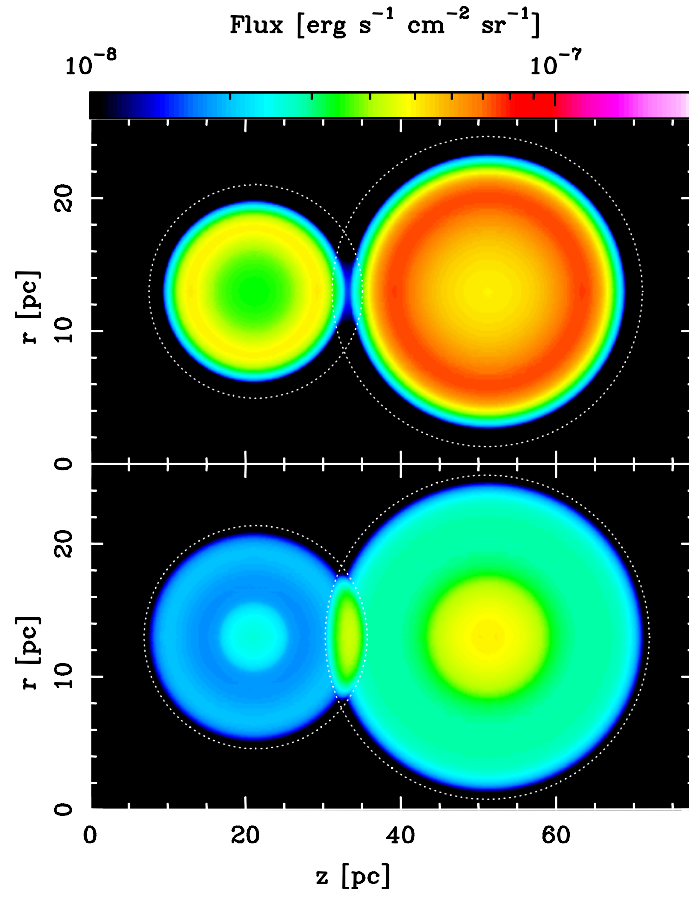


Figura A.7: Emisión de rayos X simulada para el caso *sin colisión*, sin conducción térmica (panel superior) y con conducción térmica (panel inferior). La escala es la misma que la usada en la Figura A.6. Se aplicó una rotación de 32° antes de proyectar los mapas sobre el plano del cielo de forma a recuperar la zona de superposición y la distancia entre los centros de los remanentes.

basados en dos factores importantes: si existe colisión física o no entre los remanentes, y si la conducción térmica se incluye o no en las simulaciones. Obtuvimos mapas de densidad y de rayos X que nos permitieron comparar las simulaciones con las observaciones. Las condiciones iniciales de las simulaciones fueron determinadas usando nuestros cálculos analíticos de la evolución de RSNs.

Los tamaños y velocidades de expansión de los remanentes simulados concuerdan con los observados para un tiempo de integración final de 36 kyr. Se obtuvo que si los remanentes colisionan se esperaría un aumento importante de la emisión de rayos X de la zona de interacción, de forma independiente a la presencia de conducción térmica. En cambio, si los remanente no colisionan y se obtiene la superposición mediante un efecto de proyección, observamos un incremento débil en la emisión de rayos X de la zona entre los remanentes. Esto está en mejor acuerdo con la observaciones, pues Williams & Chu (2005) reportan un aumento de solamente 2σ en la emisión de la región central con respecto a los valores promedio en el resto de los remanentes. Nuestros resultados coinciden, por lo tanto, con la hipótesis de que las cáscaras no se encuentran en contacto físico actualmente. Finalmente, confirmamos que la conducción térmica puede jugar un papel determinante en la obtención de morfologías con emisión centralizada en rayos X.

Bibliografía

- Cowie, L. L., & McKee, C. F. 1977, ApJ, 211, 135
- Cox, D. P., Shelton, R. L., Maciejewski, W., Smith, R. K., Plewa, T., Pawl, A., & Różyczka, M. 1999, ApJ, 524, 179
- Dalgarno, A., & McCray, R. A. 1972, ARAA, 10, 375
- De Colle, F., & Raga, A. C. 2005, MNRAS, 359, 164
- De Colle, F., & Raga, A. C. 2006, A&A, 449, 1061.
- Dere, K. P., Landi, E., Mason, H. E., Monsignori Fossi, B. C., & Young, P. R. 1997, A&AS, 125, 149
- Dubner, G. M., Giacani, E. B., Goss, W. M., & Winkler, P. F. 1994, AJ, 108, 207
- Dubner, G. M., Holdaway, M., Goss, W. M., & Mirabel, I. F. 1998, AJ, 116, 1842
- Giacani, E. B., Dubner, G., Cappa, C., & Testori, J. 1998, A&AS, 133, 61
- Harten, A., Lax, P., and Van Leer, B. 1983, "On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Law", SIAM Review, 5:1-20.
- Ikeuchi, S. 1978, PASJ, 30, 563
- Landi, E., Del Zanna, G., Young, P. R., Dere, K. P., Mason, H. E., & Landini, M. 2006, ApJS, 162, 261
- Landini, M., Fossi, F. C. M., 1991, A&AS, 91, 183
- Mal'ushkin, L. 2001, ApJ, 554, 561

- Mathewson, D. S., & Clarke, J. N. 1973, *ApJ*, 180, 725
- Mazzotta, P., Mazzitelli, G., Colafrancesco, S., Vittorio, N., 1998, *A& AS*, 133, 403
- Morrison, R., & McCammon, D. 1983, *ApJ*, 270, 119
- Narayan, R., & Medvedev, M. V. 2001, *ApJ*, 562, L129
- Nishiuchi, M., Yokogawa, J., Koyama, K., & Hughes, J. P. 2001, *PASJ*, 53, 99
- Rohlfs, K., & Wilson, T. L. 2000, *Tools of radio astronomy* / K. Rohlfs, T.L. Wilson. New York : Springer, 2000. (Astronomy and astrophysics library,ISSN0941-7834)
- Ryu, D., & Jones, T. W. 1995, *ApJ*, 442, 228
- Shelton, R. L., Cox, D. P., Maciejewski, W., Smith, R. K., Plewa, T., Pawl, A., & Różyczka, M. 1999, *ApJ*, 524, 192
- Shelton, R. L., Kuntz, K. D., & Petre, R. 2004, *ApJ*, 611, 906
- Schneider, E. M., de La Fuente, E., & Velázquez, P. F. 2006, *MNRAS*, 371, 369
- Spitzer, L. 1962, *Physics of Fully Ionized Gases*, New York: Interscience (2nd edition).
- Tóth, G. 2000, *Journal of Computational Physics*, 161, 605
- Tilley, D. A., Balsara, D. S., & Howk, J. C. 2006, *MNRAS*, 371, 1106
- Velázquez, P. F., de la Fuente, E., Rosado, M., & Raga, A. C. 2001, *A& A*, 377, 1136.
- Velázquez, P. F., Martinell, J. J., Raga, A. C., & Giacani, E. B. 2004, *ApJ*, 601, 885.
- Williams, R. M., Chu, Y.-H., Dickel, J. R., Beyer, R., Petre, R., Smith, R. C., & Milne, D. K. 1997, *ApJ*, 480, 618
- Williams, R. M., & Chu, Y.-H. 2005, *ApJ*, 635, 1077
- Zavala, J., Velázquez, P. F., Cerqueira, A. H., & Dubner, G. M. 2008, *MNRAS*, 387, 839