# ANEXO I: Influencia de la Calidad de Malla en las Simulaciones. Uso de Condiciones de Contorno Periódicas

## 1 Consideraciones Generales para el Mallado de un Modelo

Uno de los factores más importantes a la hora de realizar una simulación por medio de cualquier aplicación que use el método de los elementos finitos, es, sin duda alguna el mallado de la geometría objeto de simulación.

Por una parte, es importante la elección del tipo de malla. Al respecto han de considerarse los siguientes aspectos [14]:

- Tiempo necesario para crear la malla
- Costes computacionales
- El efecto de la difusión numérica

La geometría de la mayor parte de los problemas que se resuelven hoy en día por medio del análisis CFD son geometrías complejas. La creación de mallas estructuradas, o estructuradas por bloques (constituidas por elementos cuadriláteros o hexaédricos) para tales problemas puede ser, o bien extremadamente compleja, requiriendo un consumo de tiempo excesivo, o simplemente imposible. El tiempo, vital en el mundo de la ingeniería, suele llevar en estos casos a la elección de mallas de tipo no estructuradas, que emplean elementos de tipo triangular o tetraédrico.

Cuando las geometrías son complejas o el rango de longitudes de escala del flujo es grande, un mallado triangular/tetraédrico suele ser más apropiado, requiriendo un menor número de celdas que un mallado cuadrilátero/hexaédrico. Esto es debido a que las primeras permiten que las celdas sean agrupadas en regiones seleccionadas del dominio fluido, mientras que las mallas estructuradas pueden llegar a requerir un gran número de celdas en zonas donde no se necesitan. No obstante, para geometrías de un grado de complejidad medio, las mallas no estructuradas de tipo cuadriláteras/hexaédricas, ofrecen muchas de las ventajas de las mallas triangulares/tetraédricas.

En otros aspectos, las mallas cuadriláteras/hexaédricas ofrecen también ventajas respecto a las triangulares/tetraédricas. Las primeras permiten mayores relaciones de aspecto. Una relación de aspecto elevada en mallas triangulares/tetraédricas implica necesariamente mayores esquinamientos de las celdas, lo que debe evitarse siempre que sea posible, dada la repercusión negativa en la convergencia y exactitud del problema.

En cuanto a la *difusión numérica* (también llamada *difusión ficticia*, dado que no se trata de una difusión física real), se trata de una de las fuentes de error dominantes en situaciones multidimensionales. Todos los algoritmos numéricos para la resolución de flujos de fluidos presentan el problema de la difusión numérica, por los

errores de truncamiento derivados de la consideración de las ecuaciones del flujo en forma discreta. La difusión numérica está muy relacionada con la resolución de la malla. Así, mallas refinadas proporcionarán menor difusión numérica. También se minimiza el problema cuando el flujo está alineado con la malla, lo que hace más apropiadas las mallas cuadriláteras/tetraédricas al ser imposible usando una malla triangular/tetraédrica.

# 2 Importancia de la Calidad de una Malla

La calidad de la malla juega un papel importantísimo en la estabilidad y exactitud de los cálculos numéricos [14]. Algunas de las propiedades asociadas con la calidad de una malla son, por ejemplo, la *densidad y distribución de los nodos*, *suavidad*, *esquinamiento*, *relación de aspecto,* etc.

Como al mallar un modelo se define de forma discreta un recinto que en realidad es continuo, el grado de exactitud con el cual se resuelven las zonas más complejas del flujo (como zonas en las que se producen ondas de choque, zonas de mezcla, fuentes o sumideros...), dependerá de la *densidad y distribución de los nodos* de la malla en dichas zonas. Una resolución pobre de la malla en estas zonas críticas del flujo pueden alterar dramáticamente sus características.

Por ejemplo, en flujos laminares, a la hora de mallar la zona adyacente a las paredes para modelar la capa límite, es particularmente importante que se cumpla la siguiente relación:

$$y_p \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu\, x}} \leq 1$$

$y_p =$ distancia desde la pared al centro de la celda adyacente

$u_\infty =$ velocidad del flujo libre

$\nu =$ viscosidad cinemática del fluido

$x =$ distancia desde el punto donde comienza la capa límite hasta la pared

La resolución de la malla en flujos turbulentos es también muy importante. Debido a la interacción entre el flujo principal y la turbulencia, los resultados numéricos tienden a ser más sensibles a la dependencia de las características del mallado que los flujos laminares. En estos casos, la resolución de la malla requerida en las zonas adyacentes a las paredes depende del modelo de pared usado.

Desafortunadamente, en los casos tridimensionales complejos, es muy difícil predecir la localización de las zonas críticas en las que tienen lugar cambios importantes en el flujo, con el fin de definir una malla lo suficientemente refinada en dichas zonas. En el caso tridimensional estamos además condicionados por aspectos como la CPU y la memoria del ordenador usado para realizar la simulación. Naturalmente, conseguiremos mayor exactitud con mallas bien construidas y refinadas, pero a costa de mayores tiempos de cálculo y *postprocessing* de la solución.
Otro factor importante es la *suavidad* de la malla. Esta propiedad está relacionada con el cambio de volumen entre celdas adyacentes. Cambios rápidos conllevan a un

gran error de truncamiento, definido como la diferencia entre las derivadas parciales entre las ecuaciones de flujo y sus aproximaciones discretas.

También es preciso tener en cuenta la forma de las celdas. Al respecto se habla de *esquinamiento* y *relación de aspecto*.

- El *esquinamiento* de una celda se define como la diferencia entre la forma de la celda y la forma de una celda cuadrilátera del mismo volumen. Celdas muy esquinadas pueden reducir la exactitud y desestabilizar la solución. Las mallas cuadriláteras óptimas son aquellas con ángulos en los vértices próximos a 90º, mientras que las mallas triangulares deberían tener preferiblemente ángulos próximos a 60º y todos sus ángulos menores de 90º.

- La *relación de aspecto* es una medida del *estiramiento* de la celda. Para flujos no isotrópicos, el uso de relaciones de aspecto grandes puede proporcionar resultados exactos con un menor número de celdas. No obstante es conveniente no usar relaciones de aspecto superiores a la relación 5:1.

Por último, los efectos de la resolución, suavidad y forma de la malla sobre la exactitud y la estabilidad del proceso de solución, son altamente dependientes de las características del flujo objeto de simulación. Celdas muy esquinadas pueden tolerarse en zonas donde el flujo no sufre cambios, mientras que en zonas de altos gradientes pueden ser muy perjudiciales. Dado que, normalmente, no podemos determinar a priori dónde se producen los mayores gradientes, es aconsejable mallar el modelo completo con una malla de alta calidad.

# 3 Efecto de la Calidad de Malla en la Simulación del Difusor

Con la intención de verificar la influencia que la calidad del mallado tiene sobre los resultados al simular el difusor, se han usado dos modelos geométricos diferentes, ambos correspondientes al mismo difusor: 29 álabes orientados a 18°. El primero (MODELO G1) posee una calidad de malla mala y en el segundo (MODELO G2) la calidad de malla es bastante buena. En la figura AI.1 se muestra la calidad de ambos mallados. Según el criterio usado en estas gráficas, a una celda con calidad óptima se le atribuye un valor de 0.

Los métodos empleados para mallar ambos modelos son distintos. Las figuras AI.2 y AI.3 muestran una sección de ambas mallas.
Vemos que la malla del modelo G1 es una malla hexaédrica estructurada por bloques, lo que ha originado que el esquinamiento sea mucho mayor.
La malla del modelo G2 no es estructurada. Mientras las zonas próximas a las paredes de los álabes se han mallado con celdas hexaédricas, el resto son celdas prismáticas con sección triangular. El número de celdas empleado en el modelo G2 es mayor, pero en las gráficas de la calidad de malla se observa la notable diferencia entre cada modelo.

**(a) Modelo G2**
406000 celdas hexaédricas mixtas

**(b) Modelo G2**
496460 celdas hexaédricas mixtas y piramidales

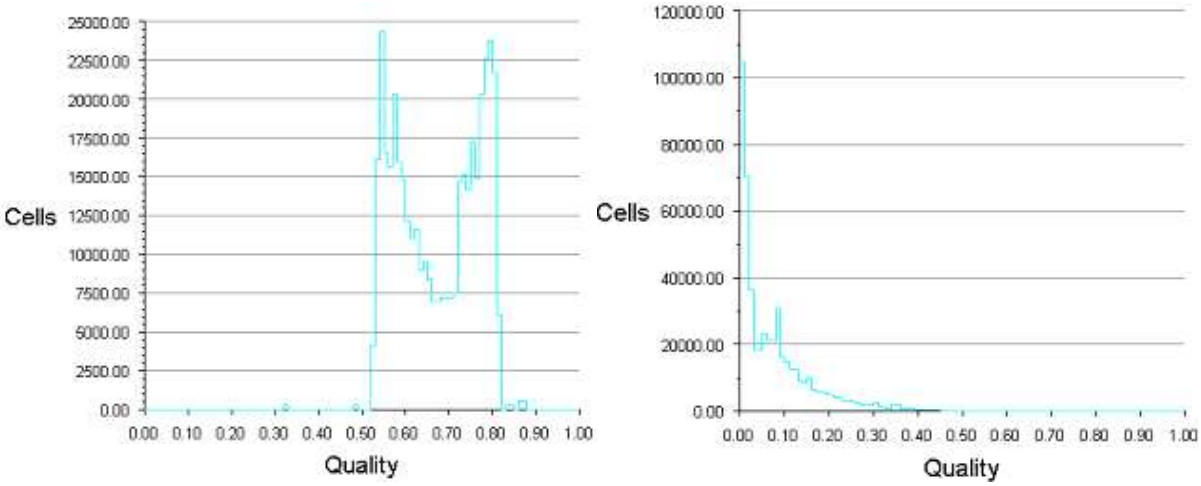



**Fig. AI.1: Calidad de malla de los modelos G1 y G2**

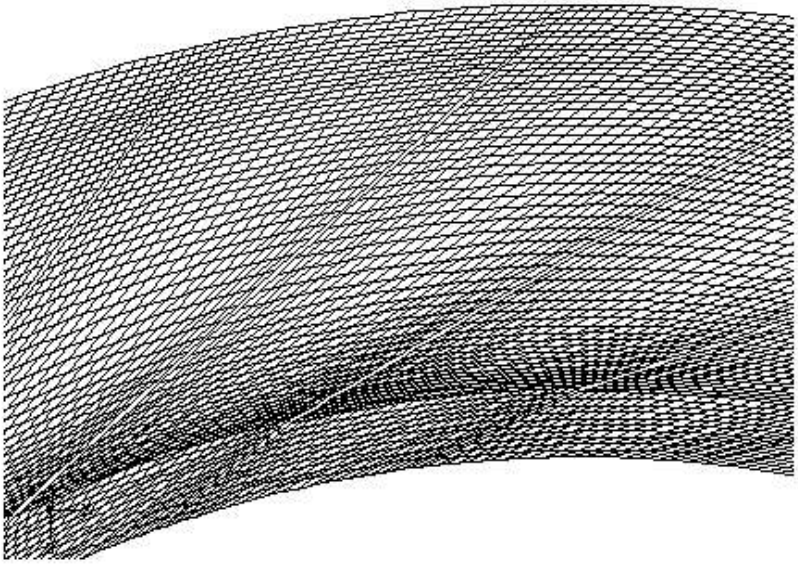


**Fig. AI.2: Malla del modelo G1**

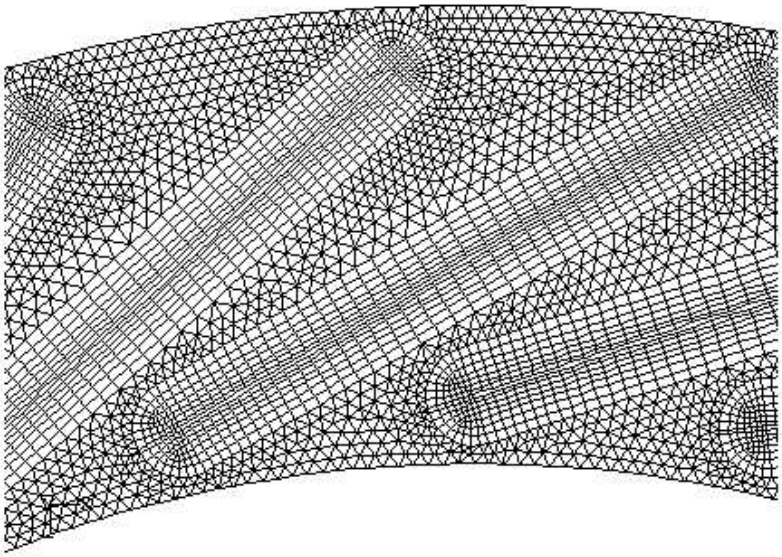


**Fig. AI.3: Malla del modelo G2**

Para ver cómo repercute la calidad de malla en los resultados se han representado los campos de velocidades en ambos modelos. Las simulaciones se efectuaron para un ángulo de entrada de la velocidad igual a 18° y empleando el mismo criterio de convergencia en todos los casos.

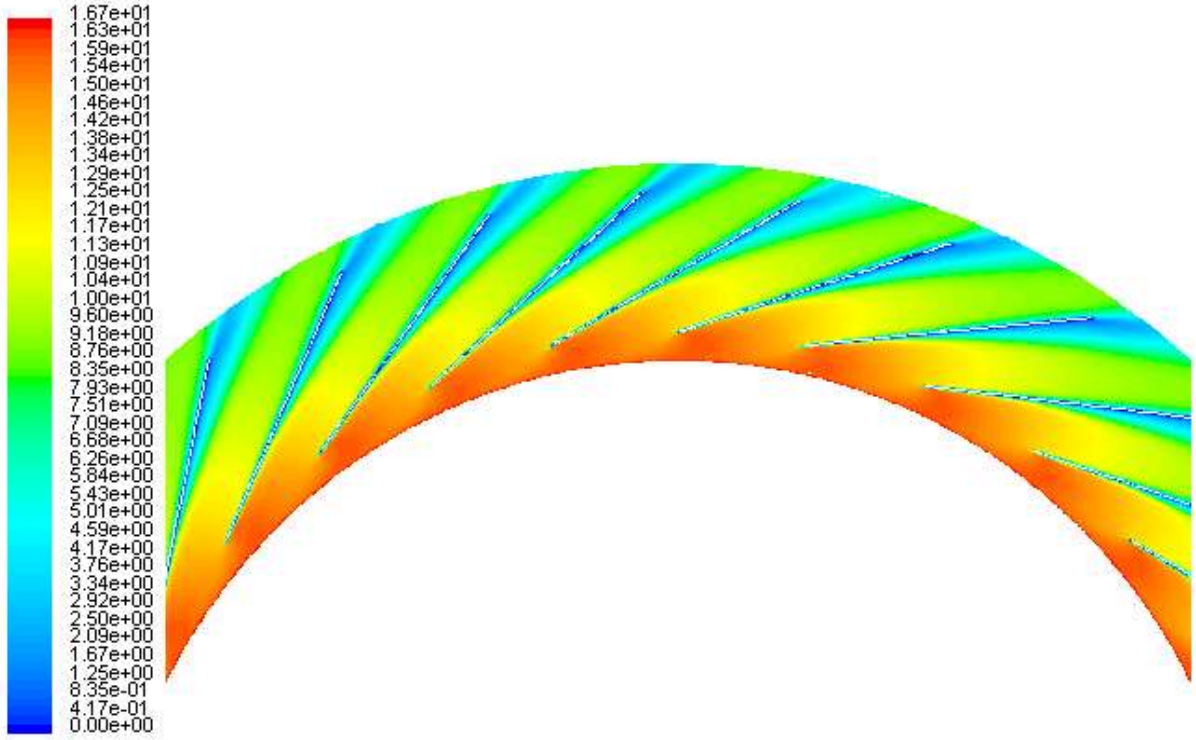



**Fig. AI.4: Campo de velocidades en el modelo G1**

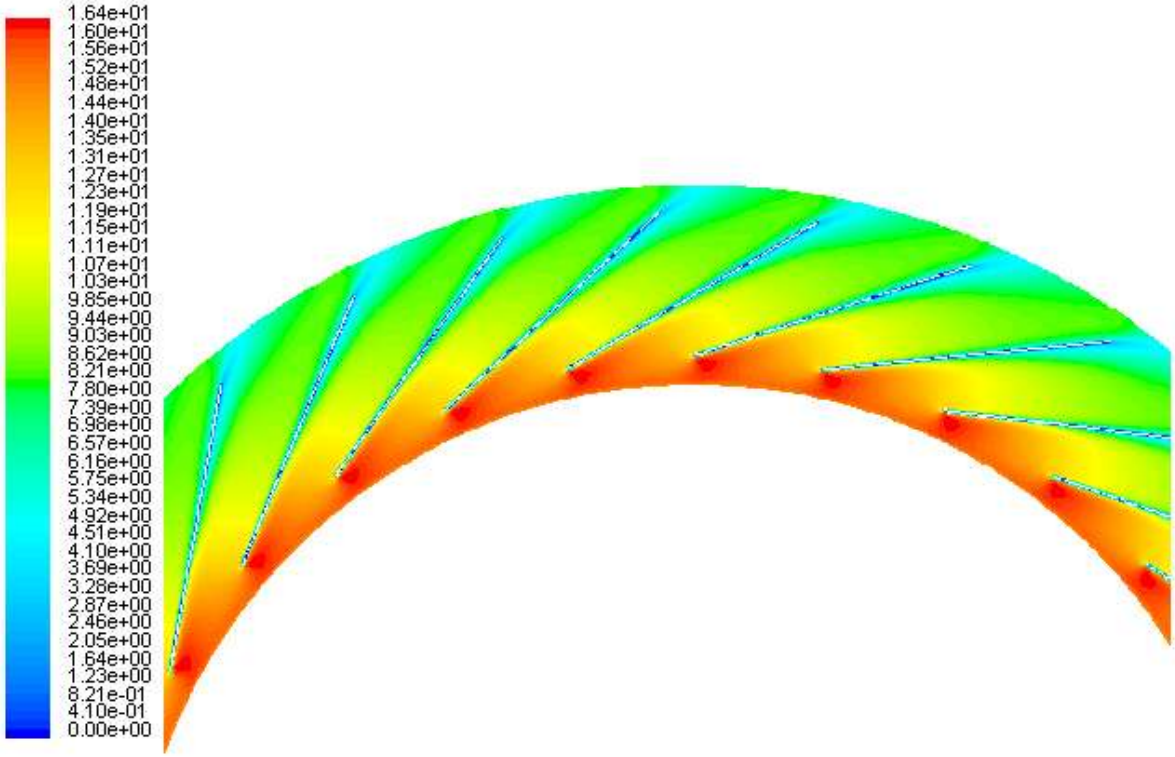



**Fig. AI.5: Campo de velocidades en el modelo G2**

Se observa parte los campos de velocidades son parecidos pero no idénticos. La diferencia se hace más evidente en la estela a la salida de los álabes. Para el modelo G1 la estela es mayor, por lo que las pérdidas serían mayores en este modelo. Sin embargo, para el modelo G2 la estela no es tan grande. También se observan diferencias en la zona de entrada próxima al borde de ataque de los álabes en la cara de succión. En el modelo G2 las velocidades más altas están más concentradas en esta zona, mientras que en el modelo G1 la distribución está más difuminada. Por otra parte, la solución debe ser simétrica siendo más clara en el modelo G2.

A pesar de que el modelo G2 se malló con un número de celdas más elevado, se alcanzó la convergencia de forma mucho más rápida y estable, requiriéndose un tiempo aproximado a los 40 minutos. En el modelo G1 resultó más costoso alcanzar la convergencia para la primera simulación (correspondiente al primer ángulo de entrada simulado) y fueron necesarios tiempos en torno a la hora en el resto.

Podemos concluir que, la calidad del mallado, es un factor muy a tener en cuenta a la hora de realizar una simulación usando herramientas de tipo CFD. En un apartado posterior también se pondrá de manifiesto su importancia en el *postprocessing*.

# 4 Uso de Condiciones de Contorno Periódicas

FLUENT ofrece la posibilidad de trabajar con condiciones de contorno periódicas. La ventaja de usar este tipo de condición de contorno es evidente: el volumen de control es menor, siendo menor tanto el un número de celdas necesario para mallar el modelo, como el tiempo de cálculo.

Para analizar la fiabilidad de su uso se construyó el *modelo P1*, cuyo volumen de control incluye tan sólo dos álabes. Comparando la solución para este modelo y la del modelo G2 (difusor completo), puede comprobarse si existe similitud en las zonas correspondientes a los contornos periódicos.

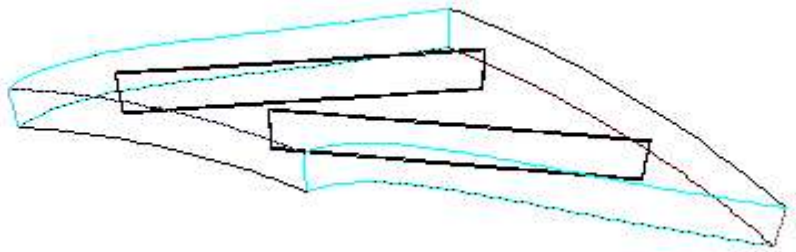


**Fig. AI.6: Modelo P1. Dos álabes con condiciones de contorno periódicas**

La figura AI.6 muestra el volumen de control del modelo P1. La estrategia de mallado, igual a la empleada en el modelo G2, queda representada en la figura AI.7, resultando un total de 36100 celdas y una buena calidad, como indica la gráfica de la figura AI.8.

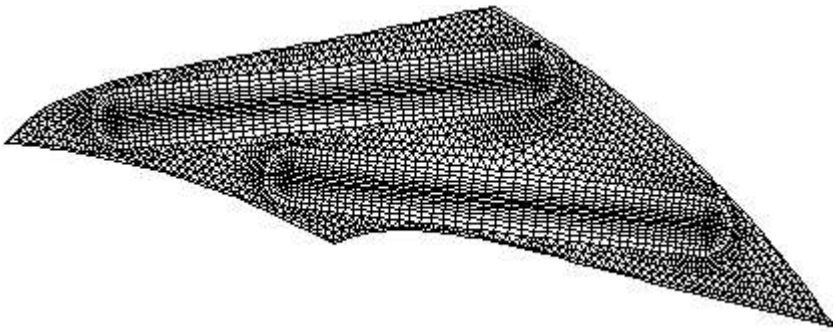


**Fig. AI.7: Mallado del Modelo P1**

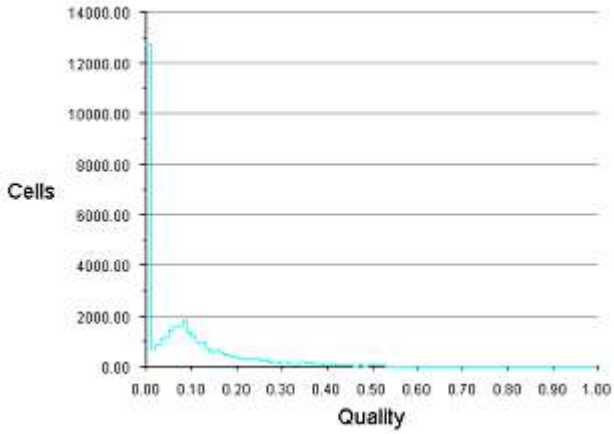



**Fig. AI.8: Calidad de Malla. Modelo P1**

La figura AI.9 es una fotografía del campo de velocidades en el modelo P1. Para conseguirla, se repitió varias veces la solución obtenida para el volumen de control, representando así el difusor completo.

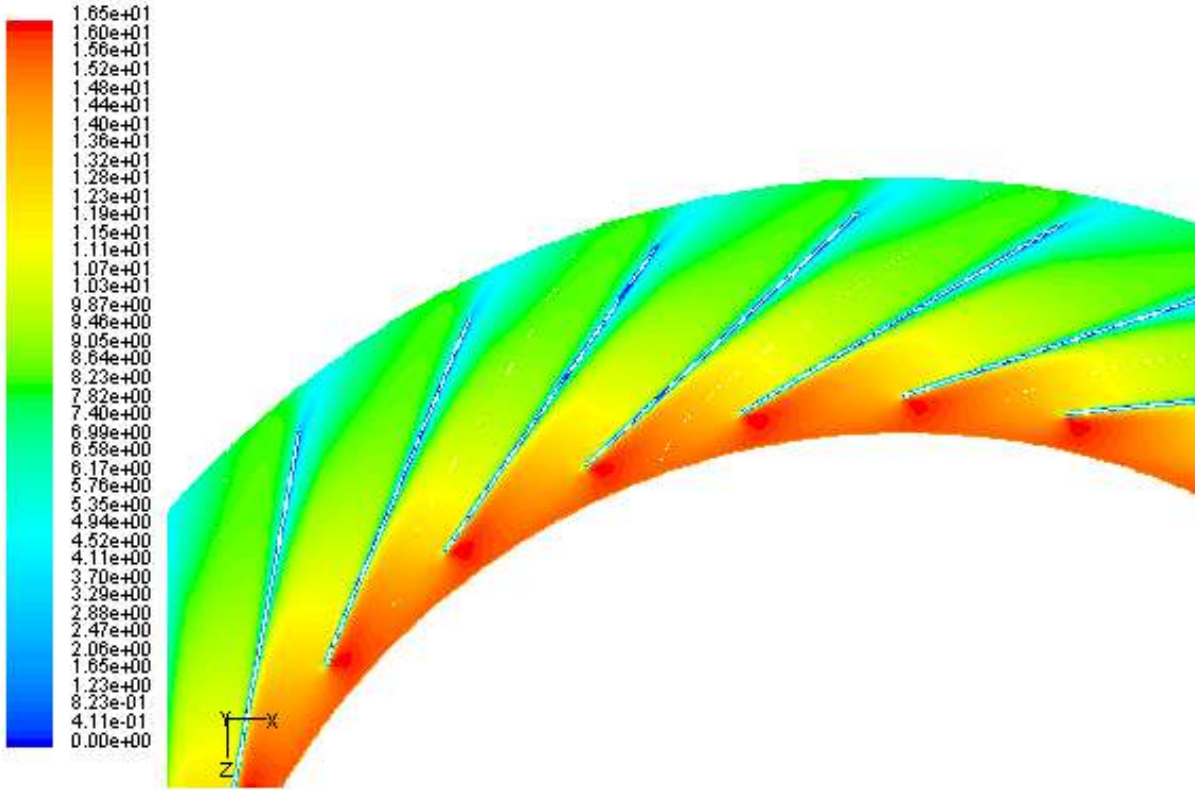



**Fig. AI.9: Campo de velocidades. Modelo P1**

Si se compara esta distribución de velocidades, con la correspondiente al modelo G2, representada de nuevo en la figura AI.10, vemos que son prácticamente idénticas.

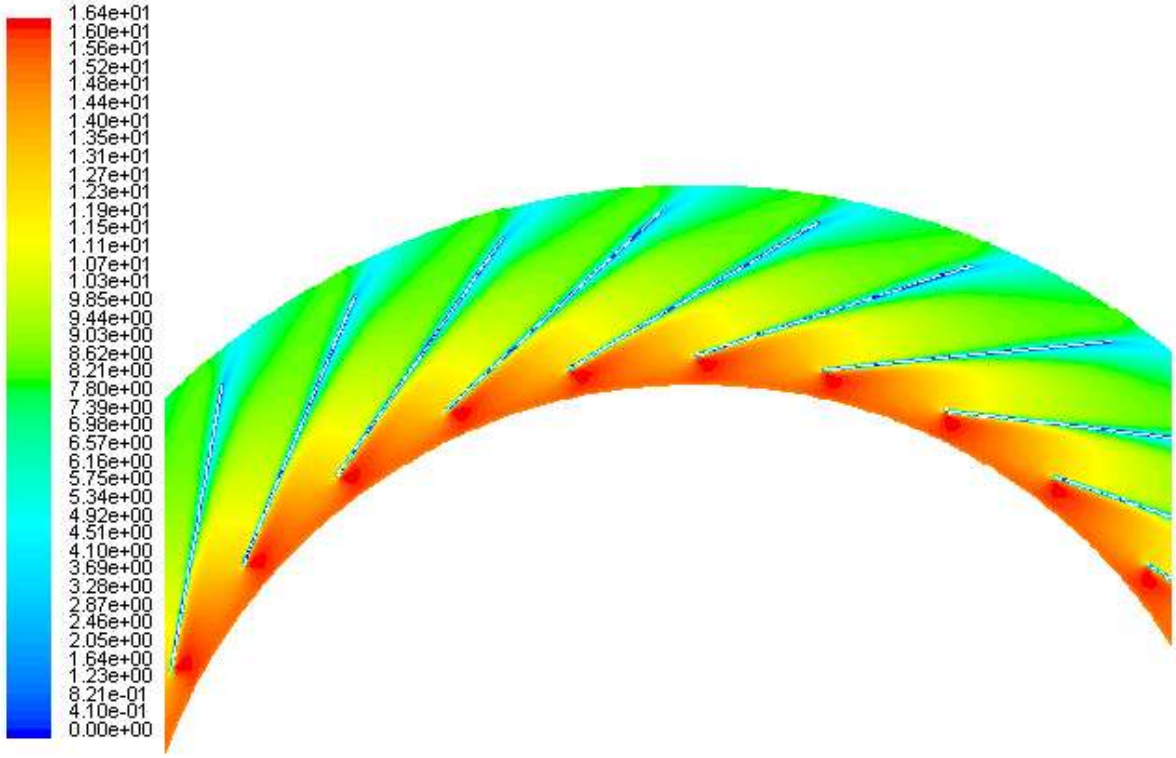



**Fig. AI.10: Campo de velocidades. Modelo G2**

Además, como se aprecia al comparar las figuras AI.11 y AI.12, la solución es también prácticamente idéntica en el canal formado por los dos álabes del modelo P1 y los canales correspondientes a los contornos periódicos.

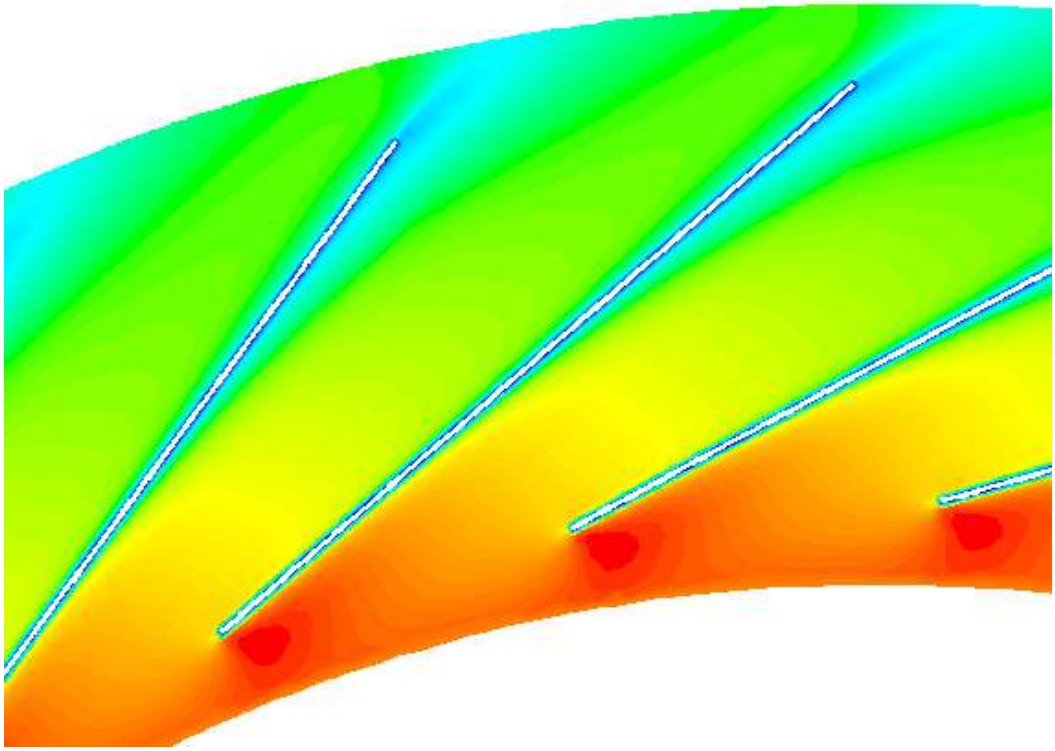


**Fig. AI.11: Campo de velocidades. Modelo G2**

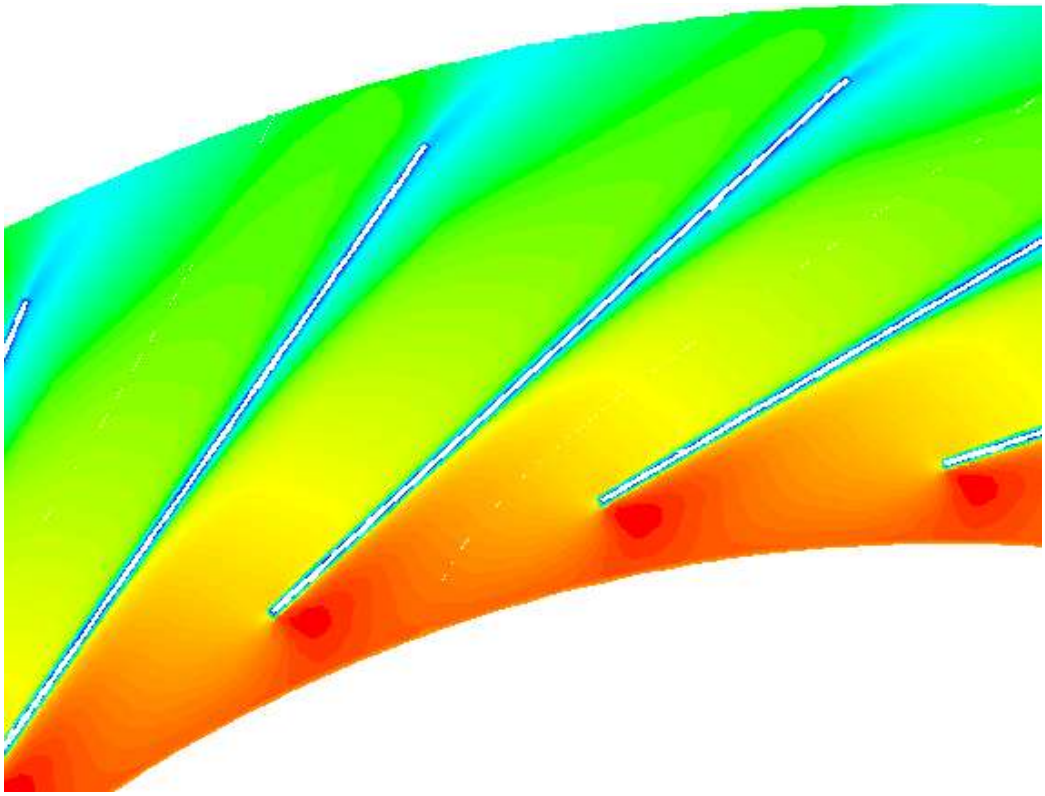


**Fig. AI.12: Campo de velocidades. Modelo P1**

A pesar de que el análisis realizado está basado en una comparación puramente visual, es suficientemente bueno como para aceptar el uso de este tipo de condiciones de contorno. Sin embargo puede completarse simplificando aún más el modelo, usando la periodicidad para simular un sólo álabe. Para ello se construyó el modelo P2 cuya geometría y mallado se muestran en la figura AI.13.

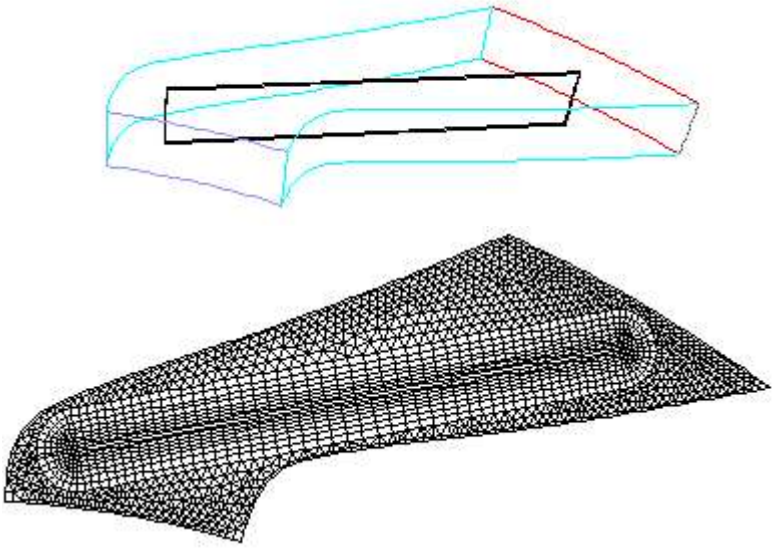


**Fig. AI.13: Modedo P2**

La técnica de mallado vuelve a ser la misma que en los modelos P1 y G2. Con un total de 36022 celdas, este modelo queda incluso más refinado. Las simulaciones consumieron un tiempo aproximado de 1 minuto y 20 segundos.

Repitiendo periódicamente la solución alcanzada se obtiene el campo de velocidades completo.

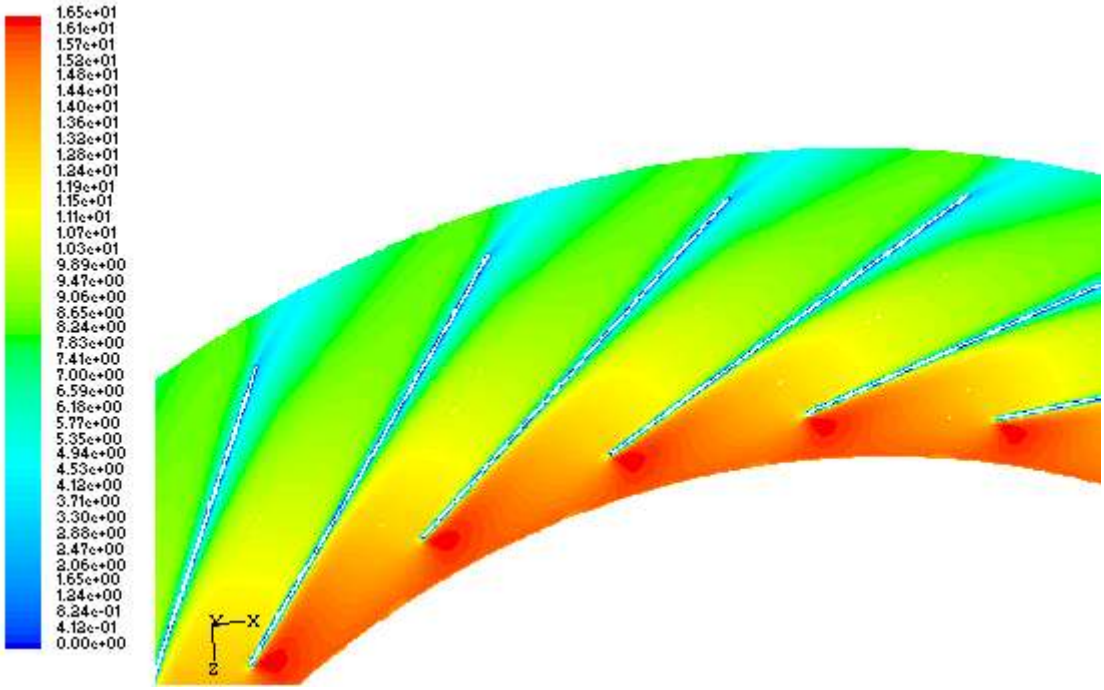



**Fig. AI.14: Campo de velocidades. Modelo P2**

Pero para observar las posibles diferencias con el modelo P1, que simulaba dos canales, es conveniente representar únicamente dos de esas repeticiones. Las figuras AI.15 y AI.16 ilustran esta comparación. Se observa que las soluciones obtenidas son, una vez más, semejantes.

### *Conclusiones*

Teniendo en cuenta la semejanza obtenida entre las soluciones para los modelos G2, P1 y P2 y las diferencias considerables de tiempos de cálculo, es razonablemente aceptable el uso de condiciones de contorno periódicas en FLUENT de forma general y, particularmente, para simular las distintas geometrías de álabe en un difusor.

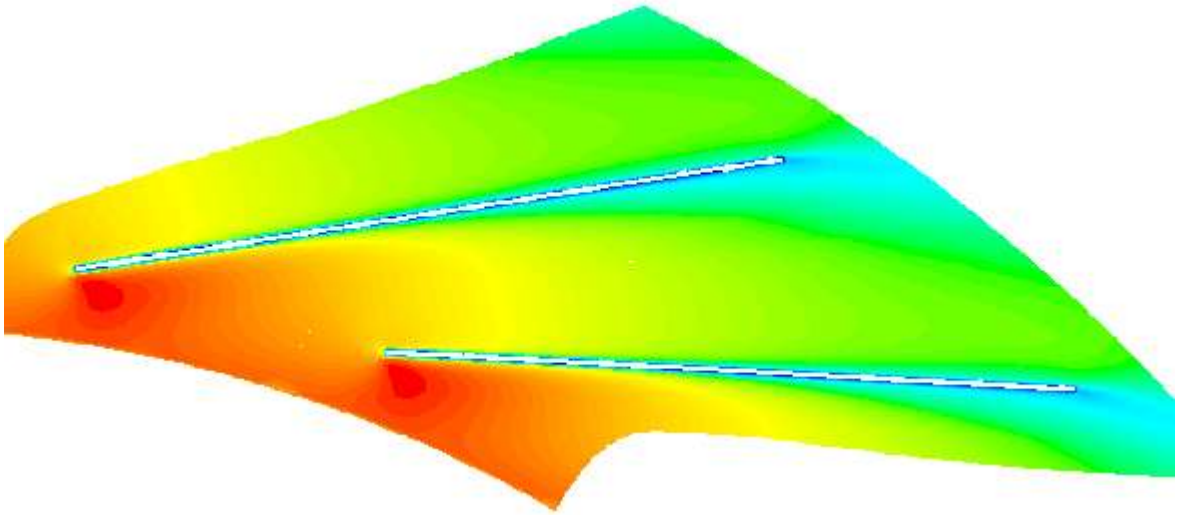


**Fig. AI.15: Campo de velocidades. Modelo P2**

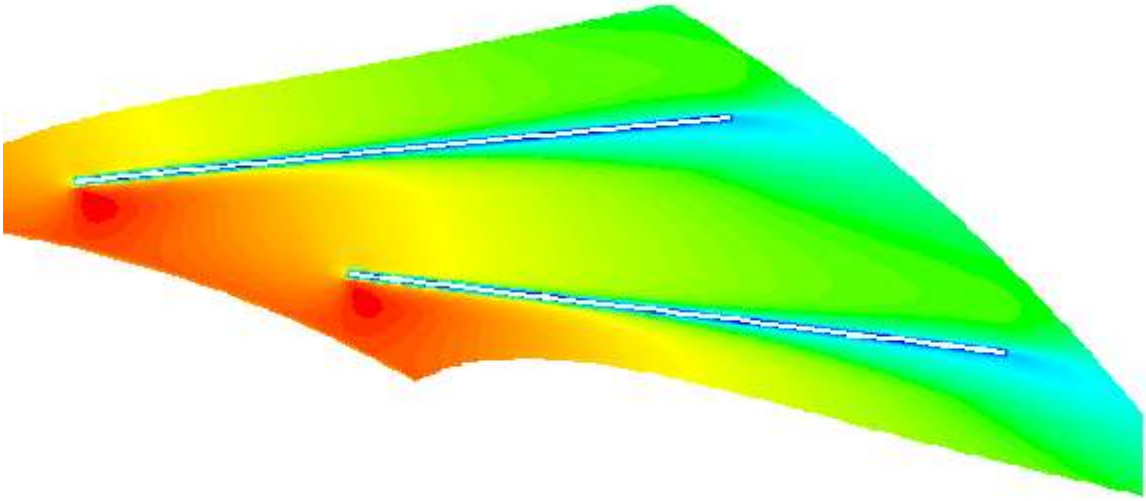


**Fig. AI.16: Campo de velocidades. Modelo P1**

# 5. Efectos Sobre el *Postprocessing*

Habitualmente, la solución obtenida por medio de una simulación para cada una de las magnitudes del flujo, se somete a una operación denominada "*postprocessing*". Esto significa que los valores numéricos de la solución se emplean para llegar a otro tipo de resultados. En este apartado se analizará la forma en que afectan a dicha operación los siguientes aspectos:

- Técnica y calidad de mallado
- Refinamiento
- Criterio de convergencia

Dado que el proceso se basa en los valores numéricos obtenidos a partir de la solución, la forma en que se miden dichos valores es muy importante. FLUENT dispone de varias herramientas para medir las magnitudes del flujo. Al respecto es importante el tipo de geometría (punto, curva, superficie o volumen) con respecto a la cual se realiza la medida, así como la posibilidad de trabajar en base a los valores alcanzados en los nodos de las celdas o en el centro de las mismas. Por ello, el

mallado afecta directamente a los cálculos realizados a partir de la solución usando estas herramientas.

Como ejemplo de aplicación, se compararon los valores de rendimiento correspondientes a cada uno de los modelos, definido como:

$$\eta_u = \frac{p_3 - p_0}{\frac{1}{2}\rho c_0^2}$$

## 5.1. Influencia de la técnica y calidad del mallado

La siguiente figura muestra los resultados del "postprocessing" aplicado a los modelos G1, G2, P1 y P2:

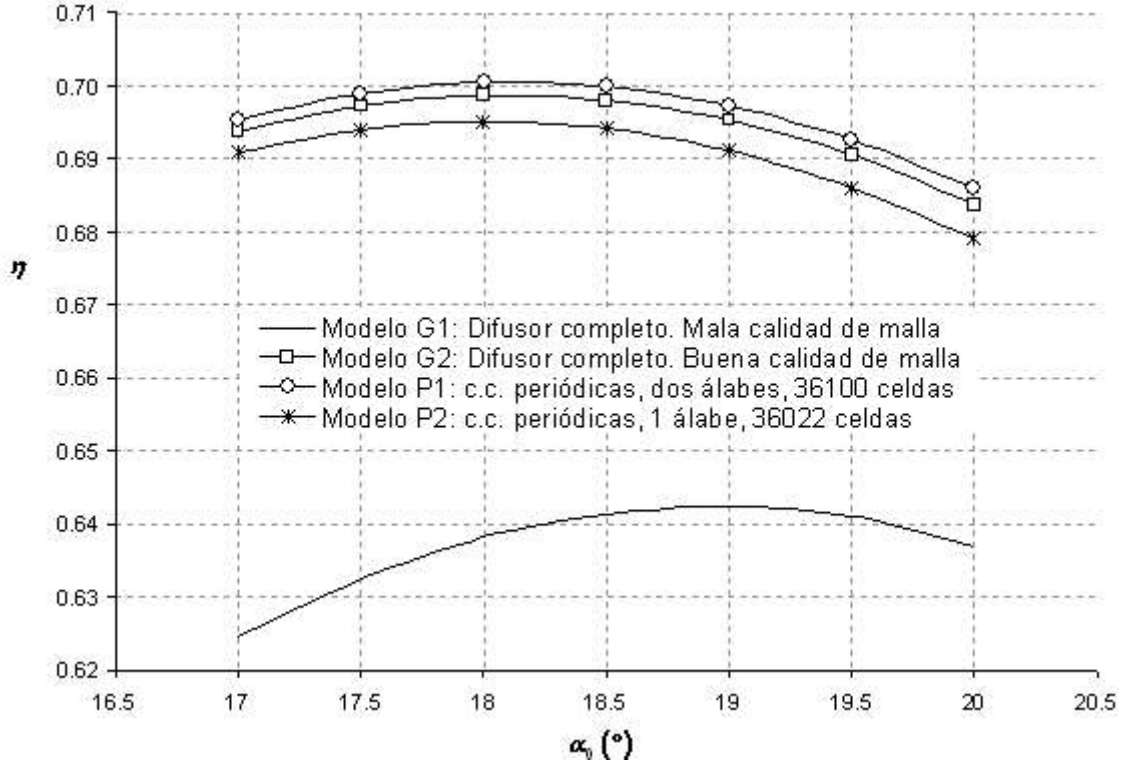



**Fig. AI.17: Rendimiento frente al ángulo de entrada.**
**Modelos G1, G2, P1 y P2**

A la entrada del difusor se fijó una condición de contorno de velocidad constante, mientras que a la salida se impuso la presión. Los puntos de las curvas obtenidas corresponden a distintos ángulos de entrada de la corriente.

Para el modelo G1, el rendimiento alcanzado es bastante menor que para los modelos G2, P1 y P2. Observando la estela a la salida de los álabes, puede entenderse que las pérdidas sean mucho mayores en este modelo a pesar de que las geometrías son exactamente iguales. Dado que las geometrías son exactamente iguales, esta diferencia de pérdidas será debida al mallado.
Continuando con el modelo G1, la forma de la curva es diferente a la de los modelos G2, P1 y P2, similar en todos ellos, presentando además el óptimo en otro punto

distinto. Estos tres modelos se mallaron con una buena calidad de malla y empleando la misma estrategia frente a la mala calidad del modelo G1, mallado con otra técnica y mala calidad.

Por tanto, la técnica de mallado y la consiguiente calidad de malla obtenida con el mismo afectan notablemente al "postprocessing".

## 5.2. Influencia de la densidad de malla o refinamiento

Las curvas correspondientes a los modelos G2, P1 y P2 representadas en la figura AII.17, presentaban diferencias que pueden ser debidas a la desigualdad geométrica. Mientras el primero simula la geometría completa, los modelos P1 y P2 usan condiciones de contorno periódicas. Dicha diferencia en la geometría existe también entre estos últimos, pues en el primero se simularon dos canales mientras que en el segundo tan sólo uno.
A pesar de que la calidad de malla es similar en todos los modelos, el refinamiento de la malla es distinto. Esta es la causa principal que podría justificar las diferencias entre los resultados de estos tres modelos.
La tabla siguiente muestra la densidad de malla para cada caso expresada en número de celdas por $cm^3$.

| Modelo | $V\ (cm^3)$ | N° de celdas | $\rho_{malla}\ \left(n^o_{celdas}/cm^3\right)$ |
|---|---|---|---|
| **G2** | 6528,6 | 496460 | 76 |
| **P1** | 450,25 | 36100 | 80 |
| **P2** | 225,12 | 36022 | 160 |

**Tabla AI.1: Densidad de malla de los modelos G2, P1 y P2**

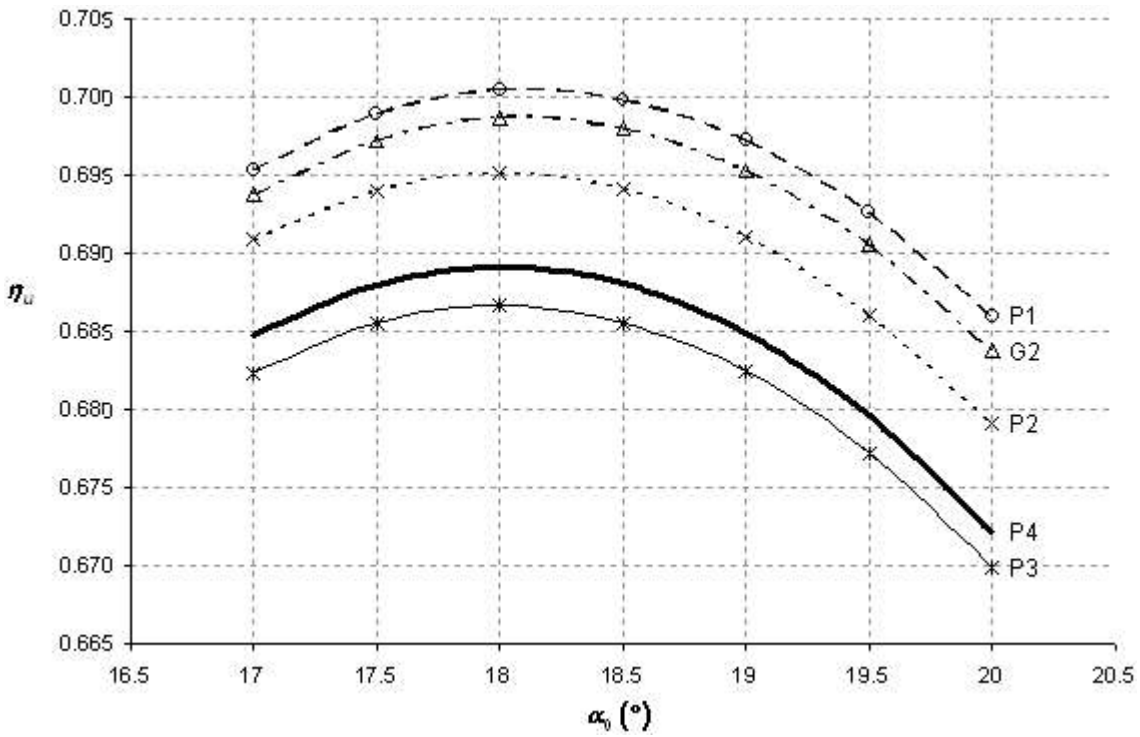
Para cuantificar en qué medida es importante este factor, se refinó el modelo P2 en dos niveles, dando lugar a los modelos P3 y P4. Esto es además interesante, porque una práctica habitual en el uso de herramientas que emplean el método de los elementos finitos, es refinar la malla del modelo una vez alcanzada la solución y seguir iterando para ver si ésta experimenta cambios sustanciosos.

La siguiente tabla recoge la densidad de malla de todos los modelos.

| Modelo | $V\ (cm^3)$ | N° de celdas | $\rho_{malla}\ \left(n^o_{celdas}/cm^3\right)$ |
|---|---|---|---|
| **G2** | 6528,6 | 496460 | 76 |
| **P1** | 450,25 | 36100 | 80 |
| **P2** | 225,12 | 36022 | 160 |
| **P3** | 225,12 | 63344 | 281 |
| **P4** | 225,12 | 105340 | 468 |

**Tabla AI.2: Densidad de malla de los modelos G2, P1, P2, P3 y P4**

La figura AI.18 muestra los resultados obtenidos:




**AI.18: Influencia de la densidad de malla sobre el rendimiento inferior**

Se observa que la forma de las curvas es exactamente la misma, pero están trasladadas. A pesar de que, aparentemente la diferencia es notable debido a la escala de la gráfica, las diferencias máximas (correspondientes a los modelos P1 y P3) no son superiores al 1,5%. Pero en estos dos modelos está incluido el efecto de considerar 1 o 2 álabes.

Si se comparan los modelos P2, P3 y P4, todos ellos para un sólo álabe, la diferencia no es superior al 0,8%. Dado que el tiempo de simulación para el modelo P4 rondó los 20 minutos y para el modelo P2 tan sólo se empleaban unos 4 minutos, parece razonable aceptar como válida una densidad de malla del orden de 150 celdas por $cm^3$. Indudablemente, se puede trabajar con una densidad menor. Lo realmente importante es usar siempre la misma densidad de malla para comparar los modelos que se simulen.

## 5.3. Influencia del criterio de convergencia

FLUENT ofrece la libertad de fijar el criterio de convergencia. En la mayoría de los casos suele exigirse que los residuos en la solución de la ecuación de continuidad sean inferiores a un determinado valor introducido por el usuario. También existe la posibilidad de esperar que los residuos alcancen un valor estacionario. Esto no merece la pena en la mayoría de los casos, ya que se pueden alcanzar resultados suficientemente aceptables sin esperar a que la solución sea estacionaria, sobre todo, porque puede requerir costes computacionales elevados.

Desde el punto de vista del *postprocessing* y, en particular, el cálculo de magnitudes derivadas de las del flujo, lo más apropiado es analizar la expresión de dicha magnitud y ver qué variables es importante alcanzar un valor estable en las simulaciones.

En el caso del rendimiento del difusor,

$$\eta_u = \frac{p_3 - p_0}{\frac{1}{2}\rho c_0^2}$$

la variable importante es la presión a la entrada. Tanto la velocidad a la entrada como la presión a la salida son condiciones de contorno impuestas, siendo el criterio de convergencia adecuado esperar una variación nula de presión a la entrada del difusor. Para ilustrar gráficamente la importancia de este factor, se simularon dos casos correspondientes a criterios de convergencia distintos:

- *Caso A*: Criterio de convergencia de residuo en continuidad inferior a $10^{-5}$.

- *Caso B*: Criterio de convergencia de variación de presión nula a la entrada del difusor.

Los resultados obtenidos se muestran en las figura AI.22.

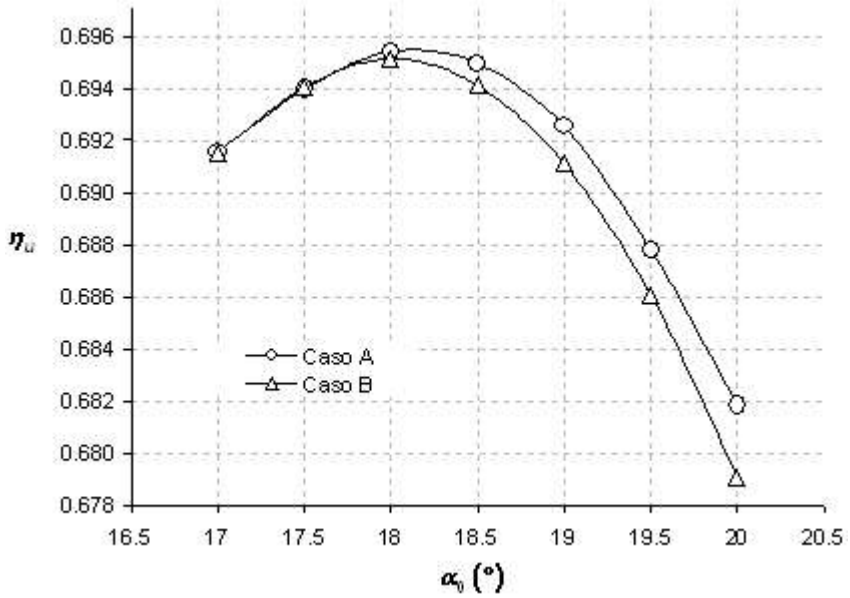



**Fig. AI.22: Rendimiento inferior para distintos criterios de convergencia**

A pesar de que las curvas son claramente distintas, las diferencias pueden no parecer significativas. Sin embargo, pueden llegar a serlo en casos en los que la magnitud a calcular dependa de las magnitudes del flujo en una forma más compleja (siendo la difusión del error mucho mayor) que en el caso del rendimiento expuesto en este ejemplo.

# 6 Comparación de las Distribuciones de Presión en las Caras de Succión y Presión de los Álabes del Difusor

A parte de las comparaciones en los campos de velocidades realizadas para analizar la influencia de la calidad de malla y uso de condiciones de contorno periódicas, se compararon los modelos G2, P1, P2, P3 y P4 por medio del rendimiento con el fin de cuantificar la influencia de la técnica, calidad y refinado del mallado y la elección del criterio de convergencia sobre el *postprocessing*.

Para llevar a cabo el análisis, se usó únicamente la expresión del rendimiento del difusor. Las aplicaciones del *postprocessing* son indudablemente mucho más numerosas que el simple cálculo de una magnitud derivada de las variables del flujo. Así, la única variable que se necesitó fue la presión a la entrada del difusor y, por consiguiente, el promedio se realiza en la superficie correspondiente a la condición de contorno de entrada del modelo. Por tanto, al usar la expresión del rendimiento para analizar la influencia de los parámetros citados sobre el *postprocessing*, no se está siendo demasiado riguroso, al considerar únicamente la solución obtenida a la entrada, obviando el resto del dominio.

Naturalmente, el valor de presión alcanzado en la entrada está influenciado por lo que ocurra en el resto del dominio, pero, para realizar una comparación distinta, se decidió comparar los modelos P2, P3 y P4, todos ellos correspondientes a un sólo álabe, considerando de alguna forma todo el dominio.

Consideremos una línea de corriente en la cual la coordenada x representa la posición. Despreciando las pérdidas y haciendo un balance entre la entrada del difusor y una posición arbitraria x se tiene:

$$p_0 + \frac{\rho}{2} c_0^2 = p_x + \frac{\rho}{2} c_x^2$$

$$\frac{\frac{\rho}{2} c_x^2}{\frac{\rho}{2} c_0^2} = \frac{p_0 - p_x}{\frac{\rho}{2} c_0^2} + 1$$

La variación de la relación de energías cinéticas entre cada punto y la entrada, viene dada por la variación de la relación entre la ganancia de presión desde la entrada hasta dicho punto desde la entrada y la energía cinética a la entrada.
Representando esta relación, por ejemplo, en las caras de succión y presión de los álabes, podremos comparar de forma eficaz las soluciones obtenidas para cada uno de los modelos.

Los resultados se muestran en la figura AI.20. Las curvas obtenidas son prácticamente coincidentes, lo cual es indicativo de que la similitud de las soluciones alcanzadas es bastante elevada a pesar de las diferencias obtenidas en los valores de rendimiento. Podríamos decir que mallar tan fino es innecesario.

Esto también demuestra que, posiblemente, caracterizar el difusor por medio del rendimiento inferior es altamente arriesgado, dado que los resultados dependen en gran medida de la forma en que se malle el modelo (geometría, calidad y densidad de malla) y de la forma en que FLUENT calcula los valores medios.

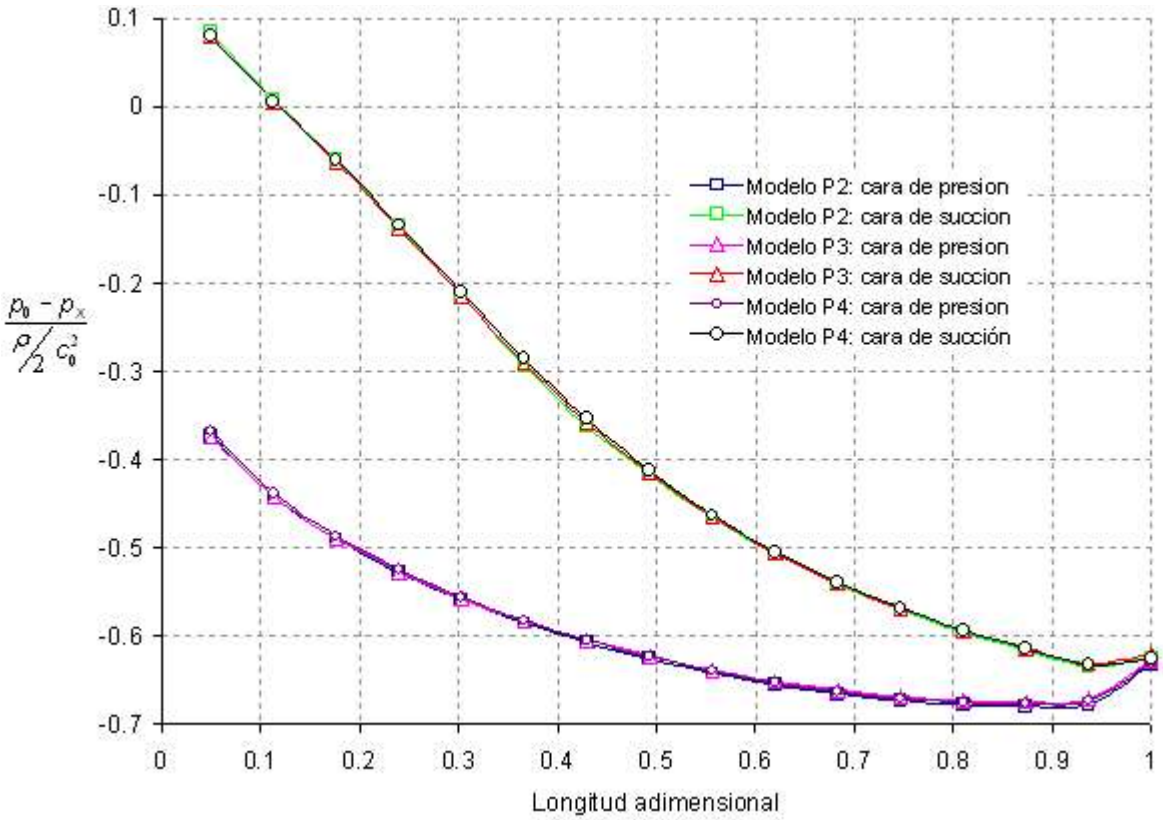



**Fig. AI.19: Comparación de los resultados en las caras de presión y succión de los modelos P2, P3 y P4**

Dado que, a pesar de todo, se empleará el rendimiento inferior como herramienta para caracterizar los modelos y compararlos, será de vital importancia mallar todos los modelos usando la misma estrategia, con la misma densidad de celdas y obtener todos los valores de la misma forma, sin olvidar usar un criterio de convergencia apropiado (variación nula de presión a la entrada del difusor).

Sólo de esta forma podremos garantizar que la comparación de los resultados obtenidos se está realizando de forma adecuada.

Para finalizar, la siguiente tabla recoge, de forma resumida, las características de los modelos usados, así como los tiempos necesarios para alcanzar la convergencia en las simulaciones.

| N° de alabes simulados | Densidad del mallado | Calidad del mallado | Tiempos de simulación | |
|---|---|---|---|---|
| | | | Primer ángulo | Resto |
| 29 (Modelo G1) | 62 | mala | sobre 1 h. | 15 Min. |
| 29 (Modelo G2) | 76 | Muy buena | sobre 40 Min | 10 Min. |
| 2 (Modelo P1) | 80 | Muy buena | 6 Min. | 1 Min. |
| 1 (Modelo P2) | 160 | Muy buena | 4 Min. | 1 Min. |
| 1 (Modelo P3) | 281 | Muy buena | 8 Min. | 1,5 Min. |
| 1 (Modelo P4) | 468 | Muy buena | 20 Min. | 3 Min. |

**Tabla AI.3: Comparación de todos los modelos analizados**