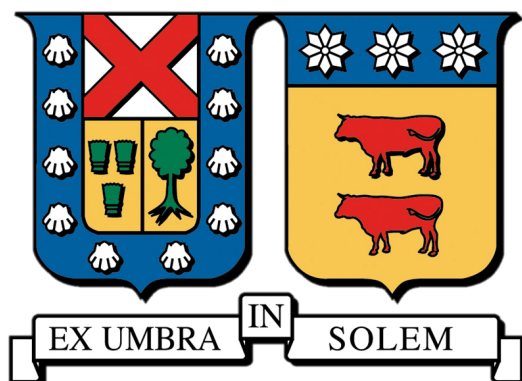


**UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA**

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL



EVALUACIÓN TÉCNICA ECONÓMICA DE LA CAPTURA  
DE CO<sub>2</sub> DIRECTAMENTE DEL AIRE MEDIANTE CARBÓN  
ACTIVADO A ESCALA INDUSTRIAL Y DOMICILIARIA

**GUILLERMO SEGUNDO CÓRDOVA CASTILLO**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL QUÍMICO

PROFESOR GUÍA: DR. IVÁN CORNEJO GARCÍA  
PROFESORES CO-REFERENTES: MSc. CONSUELO REINAO FISHER  
DR. GONZALO NUÑEZ MONTOYA

ABRIL - 2025



## CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

### 1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

**Tipo de monografía (marcar una opción):**  Memoria o trabajo de título;  Tesis de Postgrado;

**Título del trabajo:** Evaluación técnica económica de la captura de CO2 directamente del aire mediante carbón activado a escala industrial y domiciliaria.

**Nombre del candidato(a):** Guillermo Segundo Córdova Castillo

**Carrera / Grado:** Ingeniería Civil Química

**Campus:** Santiago San Joaquín ; **Departamento:** Ingeniería Química y Ambiental

### 2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Dr. Iván Andrés Cornejo García, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución

### 3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL

El trabajo **NO contiene información que amerite confidencialidad** y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (embargo) por:

6 meses;  12 meses;  2 años;  3 años;  5 años;  10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

N/A

### 4.- FIRMAS

**Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:**

Iván Andrés  
Cornejo García

Firmado digitalmente  
por Iván Andrés Cornejo  
García  
Fecha: 2025.10.03  
15:58:30 -03'00'

**Fecha:** 3-10-2025

**; Firma:** \_\_\_\_\_

**Estudiante o Candidato(a):**

**Fecha:** 03-10-2025

**; Firma:** \_\_\_\_\_

*Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.*

# Resumen

La crisis climática actual, causada por actividades humanas como la industrialización y el transporte, ha generado un aumento significativo de las emisiones de CO<sub>2</sub>, contribuyendo al calentamiento global y sus consecuencias. En respuesta, tecnologías como la Captura Directa del Aire (DAC) han emergido como soluciones para reducir las concentraciones de CO<sub>2</sub> atmosférico y cumplir con los objetivos climáticos establecidos en el Acuerdo de París. Entre los métodos DAC, la adsorción química en sólidos se destaca por su eficiencia energética, menores costos operativos y mayor escalabilidad, con materiales como el carbón activado posicionándose como una opción económica. Este material, debido a su bajo costo, resistencia a la humedad y disponibilidad, ofrece una solución viable para optimizar la captura de CO<sub>2</sub>.

Este trabajo busca evaluar técnica y económicamente la captura de CO<sub>2</sub> directamente del aire con carbón activado, considerando tanto aplicaciones industriales como domiciliarias. Para ello, se realiza una revisión exhaustiva de las tecnologías existentes, se desarrolla un modelo computacional para analizar la eficiencia de diversos materiales y se estiman los costos asociados (CAPEX, OPEX y LCOC) en escalas de 1.000, 10.000 y 100.000 toneladas anuales. Además, se diseña un aparato experimental como prototipo de prueba para validar el rendimiento del carbón activado mediante curvas de ruptura.

El modelo computacional para la captura de CO<sub>2</sub> en un lecho monolítico de carbón demuestra ser efectivo al predecir la curva de ruptura del lecho, ajustando la velocidad de canal en un factor de 10 para coincidir con datos experimentales. La tecnología basada en carbón activado muestra alta competitividad económica a escala industrial, con una reducción del CAPEX de 1.764 a 190 USD/tCO<sub>2</sub> y del LCOC de 280 a 106 USD/tCO<sub>2</sub> al incrementar la capacidad de 10 a 10.000 tCO<sub>2</sub>/año. A nivel domiciliario, un prototipo de adsorción por vacío (VSA) logra una eficiencia máxima de 18,42 mmg por cada ciclo con un CAPEX de 113 USD/g CO<sub>2</sub> y un LCOE de 1.357 USD/g CO<sub>2</sub>, aunque los altos costos limitan su viabilidad. Se sugiere optimizar el diseño mediante un sistema TVSA y con dos lechos cilíndricos semicontinuos para mejorar la eficiencia y reducir costos operativos en aplicaciones prácticas.

# Abstract

The current climate crisis, caused by human activities such as industrialization and transportation, has led to a significant increase in CO<sub>2</sub> emissions, contributing to global warming and its consequences. In response, technologies like Direct Air Capture (DAC) have emerged as solutions to reduce atmospheric CO<sub>2</sub> concentrations and meet the climate goals set in the Paris Agreement. Among DAC methods, chemical adsorption on solids stands out for its energy efficiency, lower operating costs, and higher scalability, with materials like activated carbon positioned as a cost-effective option. Due to its low cost, moisture resistance, and availability, this material provides a viable solution for optimizing CO<sub>2</sub> capture.

This study aims to assess the technical and economic viability of CO<sub>2</sub> capture from the air using activated carbon, considering both industrial and residential applications. A comprehensive review of existing technologies is conducted, a computational model is developed to analyze the efficiency of various materials, and costs (CAPEX, OPEX, and LCOC) are estimated for scales of 1,000, 10,000, and 100,000 tons per year. Additionally, an experimental prototype is designed to validate the performance of activated carbon using breakthrough curves.

The computational model for CO<sub>2</sub> capture in a monolithic activated carbon bed prove effective in predicting breakthrough curves under isothermal conditions, adjusting the flow rate by a factor of 10 to match experimental data. The activated carbon-based technology show high economic competitiveness at an industrial scale, with a reduction in CAPEX from 1,764 to 190 USD/tCO<sub>2</sub> and a decrease in LCOE from 280 to 106 USD/tCO<sub>2</sub> as the capacity increased from 10 to 10,000 tCO<sub>2</sub>/year. At the residential scale, a vacuum swing adsorption (VSA) prototype with a CAPEX of 113 USD/g CO<sub>2</sub> and an LCOC of 1,357 USD/g CO<sub>2</sub>, though high costs limit its viability. It is recommended to optimize the design using TVSA systems and semi-continuous beds to improve efficiency and reduce operational costs for practical applications.

# Agradecimientos

Deseo agradecer primero, a mi familia que me ha apoyado en todo este proceso quienes me han dado ganas para seguir adelante y por haberme entregado todas las facilidades dentro de lo posible para salir adelante frente a las adversidades y lograr ese deseoso cartón. A mis amigos de toda la vida, especialmente a mis amigos de la universidad, por su amistad y compañía en los momentos buenos y malos. Sin ellos, los años universitarios no hubieran sido los mismos, y este logro no sería solo mío, sino de todos. Estoy enormemente agradecido de las risas de todos los días, de las noches de discord, de las juntas, los carretes, el estudio en grupo, de verdad que los quiero un montón a todos. A Movimiento 0, por permitirme aprender más sobre sustentabilidad y acción sobre el cambio climático. A la Consu por ser una gran amiga y compañera que me ha ayudado a liderar la iniciativa, a todos los chicos, estoy muy agradecido del equipo que hemos formado y ojalá duremos muchos años más, porque lo que necesita este mundo es conciencia sobre la crisis climática y cada uno de nosotros pueda aportar su granito de arena.

Agradezco a las nuevas personas que llegaron a mi vida y que se quedaron, gracias por su compañía en los momentos más difíciles tanto en lo personal como en lo humano. A la gente del centro, mis ayudados de maquinaria, espero haberles enseñado algo útil en sus vidas, aunque no les guste el ramo. A los académicos, especialmente al profesor Iván Cornejo, por su apoyo constante, y a todos académicos del departamento. También a Pablo por su ayuda en el código y su compañía en el laboratorio, y al Osvaldo por ser una guía en este camino.

Finalmente, quiero destacar que este camino no ha sido solo académico, sino también de crecimiento personal. He aprendido que, a veces, las cosas no resultan como uno espera, que la vida pondrá obstáculos en el camino. Sin embargo, lo más importante es no rendirse y encontrar soluciones para cada desafío. Si no hay una solución, siempre podemos aprender de las dificultades. También aprender a soltar, a dejar ir lo que nos hace daño, y aunque al principio resulte doloroso, es un acto de amor propio. Es necesario confiar en que, con el tiempo, lo que se va dejando atrás hará espacio para lo mejor que está por venir.

Este ha sido un largo camino de aprendizaje, no solo profesional si no también humano.

# Tabla de Contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Objetivos</b>	<b>6</b>
2.1	Objetivo General . . . . .	6
2.2	Objetivos Específicos . . . . .	6
2.3	Alcances . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Antecedentes Generales</b>	<b>8</b>
3.1	Cambio Climático y Rol del CO <sub>2</sub> . . . . .	8
3.2	Emisiones Globales y de Chile . . . . .	9
3.3	Tecnologías de Captura de Carbono . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Marco Teórico</b>	<b>16</b>
4.1	Captura Directa del Aire . . . . .	16
4.1.1	Plantas DAC en funcionamiento . . . . .	17
4.1.2	Tecnologías disponibles . . . . .	19
4.2	Contactores Aire - Adsorbente . . . . .	22
4.2.1	Materiales adsorbentes para la captura de carbono . . . . .	23
4.3	Métodos de Adsorción Industrial . . . . .	26
4.3.1	Adsorción por oscilación de temperatura (TSA) . . . . .	26
4.3.2	Adsorción por oscilación de presión (PSA) . . . . .	27
4.3.3	Adsorción por oscilación de presión al vacío (VPSA) . . . . .	29
4.3.4	Adsorción por oscilación de temperatura al vacío (TVSA) . . . . .	30
4.4	Fundamentos de Adsorción de CO <sub>2</sub> . . . . .	31
4.4.1	Principios de adsorción . . . . .	31
4.4.2	Isotermas de adsorción . . . . .	32
4.4.3	Modelado y simulación de adsorción de CO <sub>2</sub> . . . . .	34
4.4.4	Métodos numéricos . . . . .	34

<b>5</b>	<b>Modelo de Proceso Industrial de Captura</b>	<b>37</b>
5.1	Diagrama del Proceso . . . . .	37
5.2	Modelo Matemático . . . . .	38
5.3	Resolución Numérica . . . . .	41
5.4	Validación . . . . .	42
<b>6</b>	<b>Análisis Económico</b>	<b>46</b>
6.1	Escalamiento Industrial . . . . .	46
6.2	CAPEX . . . . .	48
6.3	OPEX . . . . .	50
6.4	Costo nivelado de captura . . . . .	52
<b>7</b>	<b>Diseño de Equipo Escala Domiciliaria</b>	<b>55</b>
7.1	Diseño del Sistema DAC-VSA . . . . .	55
7.2	Funcionamiento de Adsorción - Desorción . . . . .	56
7.2.1	Inicio del ciclo batch . . . . .	57
7.2.2	Fase de adsorción . . . . .	57
7.2.3	Fase de desorción . . . . .	58
7.2.4	Fin del ciclo batch . . . . .	58
7.3	Curva de Ruptura . . . . .	59
7.4	CAPEX, OPEX y Costo Nivelado . . . . .	60
<b>8</b>	<b>Conclusiones y Recomendaciones</b>	<b>63</b>
	<b>Referencias</b>	<b>65</b>
<b>A</b>	<b>Costos del Aparato DAC a Escala Domiciliaria</b>	<b>I</b>
A.1	Costos de fabricación del aparato DAC . . . . .	I
A.2	Costos de operación del aparato DAC . . . . .	II
<b>B</b>	<b>Dimensionamiento Captura de Carbono</b>	<b>III</b>
B.1	Estimación de consumo de carbón activado para distintas producciones . . . . .	III

# Lista de Tablas

3.1	Costos estimados para captura directa de aire de acuerdo a la fuente energética [15].	15
4.1	Proyectos de captura directa de CO <sub>2</sub> en Norte América [23]. . . . .	18
4.2	Proyectos de captura directa de CO <sub>2</sub> en Europa [23]. . . . .	19
4.3	Tecnologías existentes de captura de carbono directa de aire [23]. . . . .	20
4.4	Comparación entre sorbentes en forma de pellets y estructura de panal [33]. . . . .	23
4.5	Materiales adsorbentes para captura de CO <sub>2</sub> [36]. . . . .	25
4.6	Resumen de modelos de isothermas de adsorción y métodos de transferencia de masa para monolitos adsorbentes [45]. . . . .	33
5.1	Parámetros y valores experimentales para la columna monolítica [52]. . . . .	41
6.1	Porcentaje del costo del equipo entregado para diferentes capacidades de captura de CO <sub>2</sub> . . . . .	51
6.2	Costo nivelado de captura de CO <sub>2</sub> para una capacidad de 1 MtCO <sub>2</sub> /año. . . . .	53
7.1	Especificaciones técnicas del diseño de la caja de adsorción y parámetros relacionados con la captura de CO <sub>2</sub> . . . . .	57
A.1	Costos de los equipos utilizados en la caja experimental para la captura de CO <sub>2</sub> . . . . .	I
A.2	Costos de Energía Operativa (OPEX) Anuales . . . . .	II
B.1	Dimensionamiento de plantas de captura de CO <sub>2</sub> a partir de carbón activado. . . . .	IV

# Lista de Figuras

1.1	Emisiones de CO <sub>2</sub> atmosférico a lo largo del tiempo [3]. . . . .	1
1.2	Predicción de las emisiones de CO <sub>2</sub> con la implementación de tecnologías DAC [6]. . . . .	2
1.3	Diagrama de proceso estándar de adsorción química de CO <sub>2</sub> [13]. . . . .	3
1.4	Ciclo de absorción química para la captura de CO <sub>2</sub> directamente del aire [14]. . . . .	4
3.1	Mediciones directas de CO <sub>2</sub> del aire medidos en el Observatorio Mauna Loa [19]. . . . .	9
3.2	Emisiones de CO <sub>2</sub> per cápita, 2023 [20]. . . . .	10
3.3	Emisiones de GEI totales (kt CO <sub>2</sub> eq) por sector, serie 1990-2022 [21] . . . . .	11
3.4	Demanda de CO <sub>2</sub> cubierta por fuentes puntuales y DAC durante la transición de 2020 a 2050 [8]. . . . .	12
3.5	Costos de captura de CO <sub>2</sub> en plantas industriales y su nivel de madurez tecnológica (TRL) [15]. . . . .	13
3.6	Gráfica de Sherwood para distintas tecnologías de separación de gases [22]. . . . .	14
4.1	Diagrama esquemático de la captura de carbono directamente del aire [23] . . . . .	17
4.2	Descripción general de la distribución de la temperatura media mensual y la humedad relativa de diferentes ubicaciones de proyectos DAC [26]. . . . .	21
4.3	Captura de carbono DAC mediante contactores monolíticos . . . . .	23
4.4	Materiales adsorbentes para captura de CO <sub>2</sub> [35]. . . . .	24
4.5	Capacidad de adsorción de CO <sub>2</sub> de varios adsorbentes y temperaturas (−47 a 710 °C) a presiones de 1 bar [35] . . . . .	26
4.6	Diagrama de flujo de un sistema de captura de CO <sub>2</sub> por adsorción por oscilación de temperatura (TSA) utilizando sorbentes sólidos [15]. . . . .	27
4.7	Esquema de un sistema de captura de CO <sub>2</sub> por adsorción por oscilación de presión (PSA) [39]. . . . .	28
4.8	Diagrama esquemático del proceso VPSA de dos lechos [40]. . . . .	29
4.9	Diagrama esquemático junto con la representación gráfica de la temperatura y presión de un TVSA de 4 pasos [40]. . . . .	30

4.10	Representación gráfica en diagrama $q - p$ de distintos tipos de isothermas de adsorción para sistemas gas-sólido [43]. . . . .	31
4.11	Diagrama de flujo de los distintos modelos de adsorción [45]. . . . .	35
5.1	Esquema general de un sistema DAC con lechos dispuestos en paralelo [51]. . . . .	38
5.2	Representación del lecho monolítico para la modelación. . . . .	38
5.3	Equilibrio de adsorción de dióxido de carbono en el monolito de panel de carbón a 298K y presión atmosférica [52]. . . . .	43
5.4	Diagrama de flujo del proceso iterativo para la determinación de la velocidad del canal. . . . .	44
5.5	Modelo de curva de ruptura de adsorción de CO <sub>2</sub> en monolito de carbón. . . . .	44
5.6	Modelo de curva de ruptura de adsorción de CO <sub>2</sub> en monolito de carbón con ajuste de velocidad por factor de 10. . . . .	45
6.1	Diagrama del proceso TVSA mostrando las etapas de adsorción (flujo de aire a presión ambiente), desorción (aplicación de vacío y calor) y enfriamiento [55]. . . . .	47
6.2	Curva de ruptura para un lecho monolítico de carbón activado a escala industrial DAC. . . . .	48
6.3	CAPEX para diferentes métodos de separación DAC en una planta de 1 MtCO <sub>2</sub> al año [58]. . . . .	49
6.4	CAPEX para una planta de captura de CO <sub>2</sub> con carbón activado, para diferentes niveles de producción. . . . .	50
6.5	OPEX para diferentes métodos de separación DAC en una planta de 1 MtCO <sub>2</sub> al año. . . . .	52
6.6	OPEX para una planta de captura de CO <sub>2</sub> con carbón activado, utilizando la red eléctrica como fuente de energía, para diferentes niveles de producción. . . . .	53
6.7	Costo nivelado para diferentes producciones utilizando carbón activado como adsorbente sólido. . . . .	54
7.1	Configuración experimental del prototipo DAC-VSA. Se destacan: (1) Lecho monolítico de carbón activado, (2) Sensores SCD30 y 26PC, (3) Bomba de vacío, (4) Válvulas check. . . . .	56
7.2	Proceso de captura en funcionamiento VSA. . . . .	59
7.3	Tiempo de ruptura del aparato DAC a escala domiciliaria. . . . .	60
7.4	Layout del prototipo de captura de dióxido de carbono DAC a escala domiciliaria. . . . .	61
7.5	Distribución de los Costos Totales de CAPEX y OPEX del aparato DAC a escala domiciliaria. . . . .	62

# Nomenclatura

Símbolo	Significado	Unidades
$C$	Concentración del componente adsorbido	mol/m <sup>3</sup>
$q$	Cantidad de adsorbato adsorbida en el sorbente	mol/m <sup>3</sup>
$\bar{q}$	Promedio de adsorción en la fase sólida	mol/m <sup>3</sup>
$q^*$	Cantidad de adsorbato en equilibrio	mol/m <sup>3</sup>
$q_{\max}$	Capacidad máxima de adsorción	mol/m <sup>3</sup>
$t$	Tiempo	s
$z$	Coordenada espacial	m
$v_{ch}$	Velocidad del fluido en el canal	m/s
$\varepsilon$	Porosidad del medio	-
$D_s$	Coefficiente de difusión en los poros	m <sup>2</sup> /s
$D_g$	Coefficiente de dispersión axial	m <sup>2</sup> /s
$w_c$	Diámetro efectivo del canal	m
$w$	Grosor de la pared del canal	m
$h$	Altura del canal	m
$h_{ave}$	Altura promedio de los canales	m
$\sigma_l$	Desviación estándar de la altura de los canales grandes	m
$\sigma_s$	Desviación estándar de la altura de los canales pequeños	m
$\sigma_w$	Desviación estándar del grosor de pared	m
$D_{ch}$	Distribución del tamaño de los canales	-
$D_w$	Distribución del grosor de las paredes	-
$N_C$	Número teórico de canales en el monolito	-
$Q$	Caudal de gas total	m <sup>3</sup> /s
$c_{ave}$	Concentración promedio de CO <sub>2</sub> en la fase gaseosa	kg/m <sup>3</sup>
$\bar{q}_{ave}$	Cantidad promedio de CO <sub>2</sub> adsorbida en la fase sólida	mol/m <sup>3</sup>
$P_{ch}$	Función de probabilidad para el tamaño del canal	-
$P_w$	Función de probabilidad para el grosor de la pared	-
$A$	Área de la sección transversal de la columna	m <sup>2</sup>
$L$	Longitud total del lecho monolítico	cm
$D$	Diámetro del lecho monolítico	cm
$L_i$	Longitud de las secciones discretas del lecho	cm

<b>Siglas</b>	<b>Significado</b>
IPCC	Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático
CCS	Captura y Almacenamiento de Carbono
DAC	Captura Directa del Aire
BECCS	Bioenergía con Captura y Almacenamiento de Carbono
CFD	Dinámica de Fluidos Computacional
FVM	Método de Volúmenes Finitos
FEM	Método de Elementos Finitos
MEA	Monoetanolamina
S-DAC	DAC Sólido
L-DAC	DAC Líquido
TSA	Adsorción por Cambio de Temperatura
PSA	Adsorción por Cambio de Presión
VSA	Adsorción por Desorción con Vacío
VSPA	Adsorción por Desorción con Vacío y Cambio de Presión
TVSA	Adsorción por Cambio de Temperatura y Vacío
ESA	Captura Electroquímica de CO <sub>2</sub>
MSA	Adsorción Sensible a la Humedad
M-DAC	Captura Directa del Aire con Membranas
CAPEX	Costos de Capital (Capital Expenditure)
OPEX	Costos Operativos (Operational Expenditure)
LCOC	Costo Nivelado de Captura (Levelized Cost of Capture)

# Capítulo 1

## Introducción

La problemática climática actual, originada en parte significativa por la actividad humana, se estima que es consecuencia del aumento de emisiones de  $\text{CO}_2$  debido al desarrollo industrial, el transporte, la agricultura y la ganadería. Este aumento ha elevado la temperatura global  $1^\circ\text{C}$  por encima de los niveles preindustriales, lo que ha causado efectos como el aumento del nivel del mar, el derretimiento de glaciares y fenómenos meteorológicos extremos [1]. Desde la era industrial, que generalmente se considera que inició a mediados del siglo XVIII (alrededor de 1750), las emisiones de  $\text{CO}_2$  han crecido considerablemente, representando el 52,74% de las emisiones de los últimos 30 años (ver Figura 1.1). Provocando un aumento  $0,85^\circ\text{C}$  en la temperatura global entre 1880 y 2012, con proyecciones de un aumento de entre  $1,4^\circ\text{C}$  y  $5,8^\circ\text{C}$  para finales del siglo XXI [2].

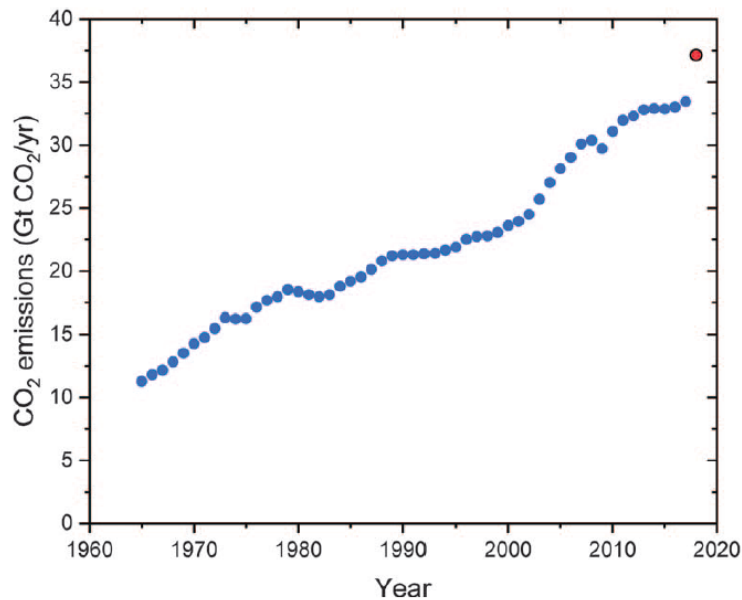


Figura 1.1: Emisiones de  $\text{CO}_2$  atmosférico a lo largo del tiempo [3].

En respuesta a esta problemática, el Acuerdo de París, vigente desde 2016, tiene como objetivo limitar el aumento de la temperatura global a menos de 2°C respecto a niveles preindustriales y alcanzar la neutralidad climática en 2050 [4]. Para cumplir con esta meta, se requiere reducir aproximadamente 1,4 mil millones de toneladas de CO<sub>2</sub> anuales [5]. En este contexto, los métodos de captura, utilización y almacenamiento de carbono atmosférico (CCUS) se han posicionado como alternativas clave. Entre ellos, la Captura Directa del Aire (DAC) destaca como una tecnología crucial debido a su capacidad para extraer CO<sub>2</sub> directamente de la atmósfera, así se contribuye a la reducción de las concentraciones globales de este gas para 2050 como se observa en la Figura 1.2.

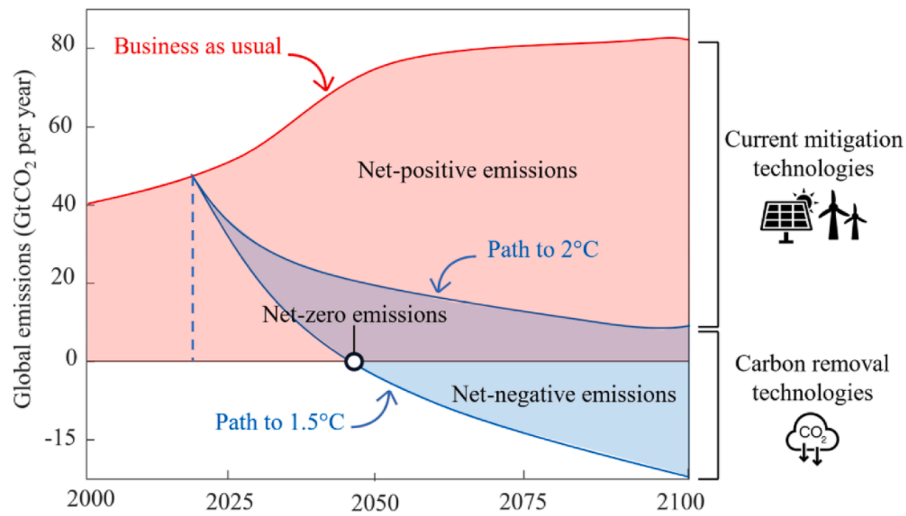


Figura 1.2: Predicción de las emisiones de CO<sub>2</sub> con la implementación de tecnologías DAC [6].

La DAC ofrece varias ventajas, como su versatilidad de ubicación, la compatibilidad con energías renovables y la capacidad de proporcionar una fuente sostenible de CO<sub>2</sub> para aplicaciones industriales y energéticas [7]. De hecho, se proyecta que, para 2040, el 67% de la demanda global de CO<sub>2</sub> destinada a combustibles sintéticos será cubierta mediante DAC, cifra que se incrementará al 80% para 2050 [8]. Sin embargo, esta tecnología enfrenta importantes desafíos técnicos y económicos debido a la baja concentración de CO<sub>2</sub> en el aire, lo que exige manejar grandes volúmenes de aire con un considerable consumo energético [9]. En comparación con otras tecnologías de Captura, Utilización y Almacenamiento de Carbono (CCUS), como la captura en fuentes puntuales (CCS tradicional), el DAC no depende de la ubicación de las emisiones, lo que la hace ideal para abordar emisiones difusas o históricas. No obstante, el CCS tradicional es más eficiente en términos energéticos y económicos, ya que captura CO<sub>2</sub> directamente de chimeneas industriales, donde la concentración de CO<sub>2</sub> es significativamente mayor (10-30%). Por otro lado, en comparación con soluciones basadas en la naturaleza, como la reforestación, el DAC no compite por tierras agrícolas y puede implementarse en áreas urbanas o desérticas, aunque su impacto ambiental

depende críticamente del uso de energías renovables [9].

Para superar estas limitaciones del DAC, se emplean principalmente dos tipos de sistemas de separación: la adsorción química en sólidos y la absorción química en líquidos. Las tecnologías que utilizan adsorción, como las desarrolladas por empresas como Climeworks y Global Thermostat, son especialmente atractivas debido a su bajo consumo energético. Estos sistemas utilizan sorbentes sólidos cargados de aminas que se regeneran mediante calor o presión reducida [10] (ver Figura 1.3). Este proceso es eficiente a bajas temperaturas, ya que el  $\text{CO}_2$  se adhiere preferentemente a la superficie del material, mientras que el resto del aire pasa a través del sistema [11]. Además, los materiales empleados suelen ser altamente porosos, lo que maximiza la captura de  $\text{CO}_2$  [12].

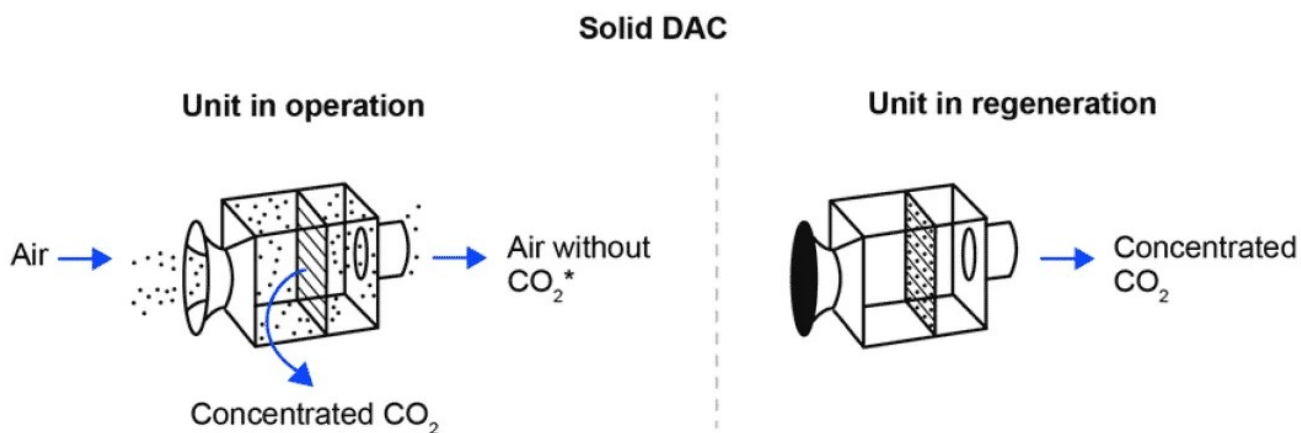


Figura 1.3: Diagrama de proceso estándar de adsorción química de  $\text{CO}_2$  [13].

Por otro lado, la absorción en líquidos, como la utilizada por la empresa canadiense Carbon Engineering, se basa en soluciones acuosas de hidróxido de potasio ( $\text{KOH}$ ) que reaccionan químicamente con el  $\text{CO}_2$  del aire, formando carbonato de potasio ( $\text{K}_2\text{CO}_3$ ). Este proceso consta de varias etapas: primero, el  $\text{CO}_2$  es capturado al reaccionar con el  $\text{KOH}$ ; luego, el carbonato de potasio se regenera mediante la adición de hidróxido de calcio ( $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ) generado en un equipo de apagado o "slaker", produciendo carbonato de calcio ( $\text{CaCO}_3$ ) y recuperando el  $\text{KOH}$ . Finalmente, el carbonato de calcio se calienta en un calcinador a altas temperaturas ( $800\text{-}900^\circ\text{C}$ ) para liberar  $\text{CO}_2$  puro y regenerar el óxido de calcio ( $\text{CaO}$ ), que se reutiliza en el ciclo. Aunque este método es eficiente para capturar  $\text{CO}_2$  en bajas concentraciones y produce  $\text{CO}_2$  de alta pureza, requiere un consumo energético significativo debido a las altas temperaturas necesarias para la regeneración, así como sistemas complejos para manejar los reactivos y los ciclos de captura y liberación [14].

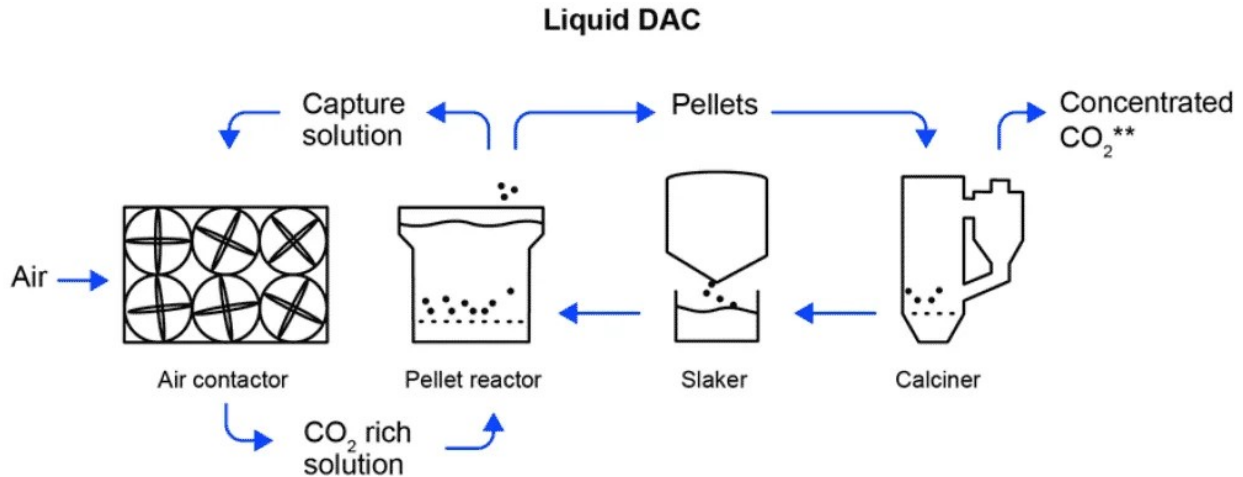


Figura 1.4: Ciclo de absorción química para la captura de CO<sub>2</sub> directamente del aire [14].

Entre los dos métodos, los sistemas de adsorción parecen ser los más prometedores, ya que combinan menor consumo de energía, costos operativos más bajos y la posibilidad de operar a temperaturas moderadas, lo que facilita su escalabilidad [7]. Los sistemas de adsorción, como los que utilizan carbón activado o materiales funcionalizados con aminas, suelen tener un consumo energético en el rango de 0.15 a 0.31 MWh por tonelada de CO<sub>2</sub> capturado para la regeneración del adsorbente [15]. Los sistemas de absorción, como los que utilizan hidróxido de potasio (KOH) o soluciones de aminas, requieren un consumo energético significativamente mayor, especialmente durante la etapa de regeneración térmica. El consumo energético para la regeneración de solventes líquidos puede variar entre 0.5 y 1.5 MWh por tonelada de CO<sub>2</sub> capturado, dependiendo del diseño del sistema y las condiciones operativas [14].

Los sistemas de adsorción están diseñados para maximizar el área de contacto aire-sorbente y minimizar la caída de presión, logrando una captura eficiente de CO<sub>2</sub> incluso en bajas concentraciones atmosféricas. La selección adecuada de materiales y la optimización de la geometría juegan un papel crucial en la mejora del rendimiento y la viabilidad económica de estas tecnologías [16, 13]. El precio de los adsorbentes varía entre \$15 y \$100 por tonelada de CO<sub>2</sub> capturado, dependiendo del tipo de sorbente utilizado [17]. Por lo tanto, la reducción de los costos de los adsorbentes podría contribuir significativamente a la disminución del costo total de los procesos DAC. Las propiedades de los materiales adsorbentes son cruciales para la captura de CO<sub>2</sub>, destacando las zeolitas, los MOFs y los materiales basados en carbón. Las zeolitas, como la 13X, son populares por su estructura porosa, aunque sensibles a la humedad. Los MOFs sobresalen por su alta área superficial y flexibilidad estructural [12]. Entre ellos, el carbón activado se posiciona como una

opción prometedora gracias a su bajo costo, resistencia a la humedad y capacidad de producción a partir de materiales naturales o residuales, consolidándose como un candidato de bajo costo para aplicaciones en captura de carbono.

En este trabajo, el objetivo principal es determinar la viabilidad técnica y económica del carbón activado como material adsorbente en procesos de captura directa de CO<sub>2</sub> del aire (DAC). Para lograrlo, se busca optimizar la configuración de los sistemas DAC para superar desafíos clave como el costo de los adsorbentes y la capacidad de adsorción de estos materiales. En consecuencia, la pregunta de investigación planteada es si el uso de carbón activado en el contactor para el proceso de captura de CO<sub>2</sub> directamente del aire puede reducir significativamente los costos operativos y de capital, aumentando así la competitividad y la eficiencia del proceso DAC.

# Capítulo 2

## Objetivos

### 2.1 Objetivo General

Evaluar de manera técnica y económica la captura de CO<sub>2</sub> directamente del aire utilizando carbón activado como adsorbente, considerando escalas industriales y domiciliarias.

### 2.2 Objetivos Específicos

- i. Determinar la tecnología de adsorción acorde para la captura directa del aire con carbón activado, mediante análisis de tecnologías disponibles.
- ii. Evaluar la eficiencia del carbón activado mediante la elaboración de un modelo computacional de captura de CO<sub>2</sub>.
- iii. Estimar los costos de inversión (CAPEX), operación (OPEX) y costo nivelado de captura de CO<sub>2</sub> (LCOC) para escalas industriales de 1.000, 10.000 y 100.000 toneladas de CO<sub>2</sub> por año.
- iv. Diseñar un dispositivo experimental que permita evaluar la dinámica de adsorción y curvas de ruptura del carbón activado para la captura directa de aire.

## 2.3 Alcances

Se evalúa la eficiencia técnica y económica del proceso de captura de dióxido de carbono directamente del aire, considerando los costos asociados por tonelada de CO<sub>2</sub> capturado. Para ello, se utiliza el software de programación MATLAB para simular el proceso de captura en un lecho monolítico de canales cuadrados, elaborado a partir de carbón activado basado en madera, incorporando ajustes en la velocidad del flujo dentro de los canales para garantizar la precisión y efectividad del modelo. Este enfoque permite optimizar el diseño y la operación de sistemas de captura directa de aire, maximizando la eficiencia de adsorción en diferentes adsorbentes y contribuyendo al desarrollo de tecnologías sostenibles para combatir el cambio climático.

Se propone el diseño de un dispositivo experimental a escala domiciliaria basado en un sistema de adsorción por oscilación de vacío (VSA), utilizando carbón activado como material adsorbente. El prototipo contempla la integración de sensores de CO<sub>2</sub>, temperatura y presión para monitorear en tiempo real la eficiencia de captura, junto con una bomba de vacío que permitirá la regeneración del adsorbente mediante ciclos de desorción. La estructura del sistema es fabricada en acrílico, seleccionado por su transparencia (para facilitar la observación interna) y su bajo costo. Este diseño permitirá evaluar el rendimiento del carbón activado bajo condiciones reales de temperatura ambiente y humedad.

# Capítulo 3

## Antecedentes Generales

### 3.1 Cambio Climático y Rol del CO<sub>2</sub>

El cambio climático se ha consolidado como uno de los desafíos más apremiantes del siglo XXI, causado principalmente por el aumento de las concentraciones de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) en la atmósfera debido a actividades humanas. Este gas de efecto invernadero, aunque es parte natural del ciclo del carbono, ha sido incrementado significativamente por la extracción y quema de combustibles fósiles, la deforestación, los incendios forestales y procesos industriales intensivos. Desde el inicio de la Revolución Industrial, las actividades antropogénicas han elevado las concentraciones de CO<sub>2</sub> en un 50%, alcanzando niveles históricos sin precedentes: de 280 ppm (partes por millón) en 1750 a más de 420 ppm en 2024 [18]. Este incremento ha intensificado el efecto invernadero y acelerando el calentamiento global.

El dióxido de carbono atmosférico contribuye por su interacción con ciclos naturales, como el de la fotosíntesis. Durante la primavera boreal, las plantas absorben CO<sub>2</sub> para crecer, reduciendo temporalmente su concentración atmosférica. Este proceso se revierte en otoño, cuando la descomposición de la materia orgánica devuelve el CO<sub>2</sub> al aire. Sin embargo, estas oscilaciones estacionales, aunque importantes para la regulación natural del CO<sub>2</sub>, no compensan el continuo aumento anual impulsado por las actividades humanas, como muestran los registros en el Observatorio de Mauna Loa, Hawái en la Figura 3.1. Este fenómeno, evidenciado por un patrón de dientes de sierra en los datos históricos, ilustra cómo las emisiones antropogénicas dominan sobre los ciclos naturales [19].

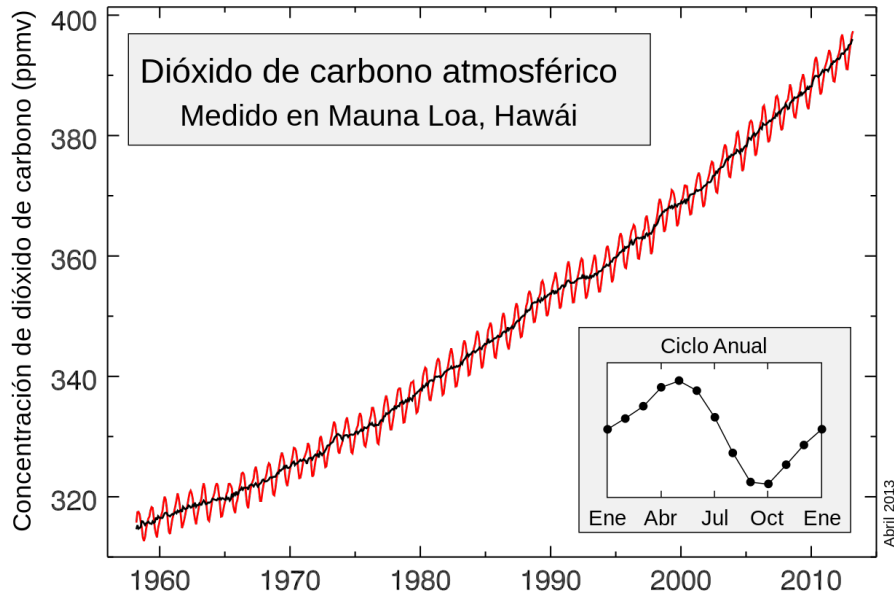


Figura 3.1: Mediciones directas de  $\text{CO}_2$  del aire medidos en el Observatorio Mauna Loa [19].

En respuesta a esta crisis, el Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC) ha señalado la necesidad de limitar el aumento de la temperatura global a  $1,5^\circ\text{C}$ – $2^\circ\text{C}$  para finales de este siglo. Esto exige no solo una drástica reducción de emisiones futuras, sino también la disminución de la concentración de  $\text{CO}_2$  ya presente en la atmósfera.

## 3.2 Emisiones Globales y de Chile

Las emisiones de dióxido de carbono son el principal motor del cambio climático global. Para evitar los peores efectos del cambio climático, se requiere una reducción urgente de las emisiones. Sin embargo, cómo se debe compartir esta responsabilidad entre regiones, países e individuos ha sido objeto de interminables debates en las negociaciones internacionales. A lo largo del tiempo, las emisiones de  $\text{CO}_2$  han crecido significativamente, alcanzando más de 35 mil millones de toneladas por año, aunque el crecimiento de las emisiones ha comenzado a desacelerarse en los últimos años. Asia, particularmente China, es el mayor emisor de  $\text{CO}_2$ , representando aproximadamente la mitad de las emisiones globales. Por su parte, América del Norte, liderada por los EE. UU., y Europa continúan siendo emisores significativos. Las desigualdades en las emisiones per cápita son evidentes, con países desarrollados como EE. UU., Australia y Canadá emitiendo niveles mucho más altos que la media global. En contraste, países en vía de desarrollo de África, como Chad, Níger y la

## Per capita CO<sub>2</sub> emissions, 2023

Carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) emissions from fossil fuels and industry<sup>1</sup>. Land-use change is not included.

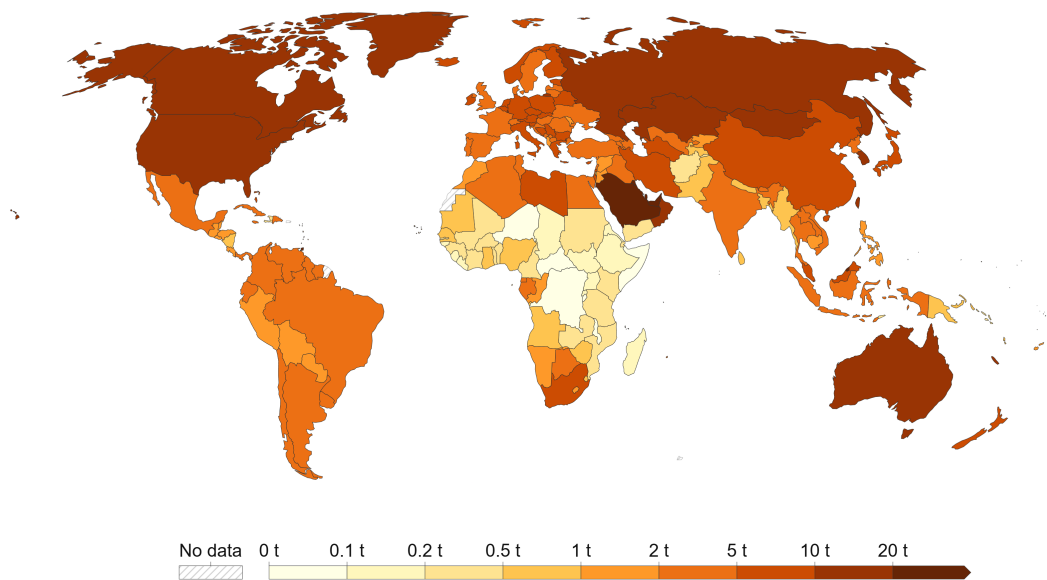


Figura 3.2: Emisiones de CO<sub>2</sub> per cápita, 2023 [20].

República Centroafricana, presentan emisiones per cápita considerablemente más bajas. En la Figura 3.2, se presenta una gráfica que ilustra las emisiones globales de CO<sub>2</sub> por país.

En Chile, el informe del INGEI, correspondiente al período 1990-2022, presenta una tendencia al alza en las emisiones de gases de efecto invernadero, especialmente de dióxido de carbono. En 2022, las emisiones totales de GEI alcanzaron los 111.049 kt CO<sub>2</sub> eq, lo que representa un aumento del 135% respecto a 1990 y un incremento del 7,1% respecto a 2020. Los principales causantes de estas emisiones son la quema de combustibles fósiles en los sectores de energía, transporte y generación eléctrica, así como las emisiones del sector agrícola [21].

El sector energético es el mayor contribuyente, representando el 51% del balance de GEI y el 76% de las emisiones totales de CO<sub>2</sub>. Las emisiones asociadas al ganado (CH<sub>4</sub>) y al uso de nitrógeno en la agricultura (N<sub>2</sub>O) también tienen una participación significativa, aunque menor en comparación con el CO<sub>2</sub>. En 2022, el CO<sub>2</sub> representó el 76% de las emisiones totales de GEI, seguido del metano (14%), óxido nitroso (5%) y los gases fluorados (5%). El balance de emisiones y absorciones de GEI se ve influido por las absorciones de CO<sub>2</sub> de las tierras forestales [21]. En la Figura 3.3 se presenta un gráfico que ilustra la participación de los sectores en las emisiones totales de CO<sub>2</sub>.

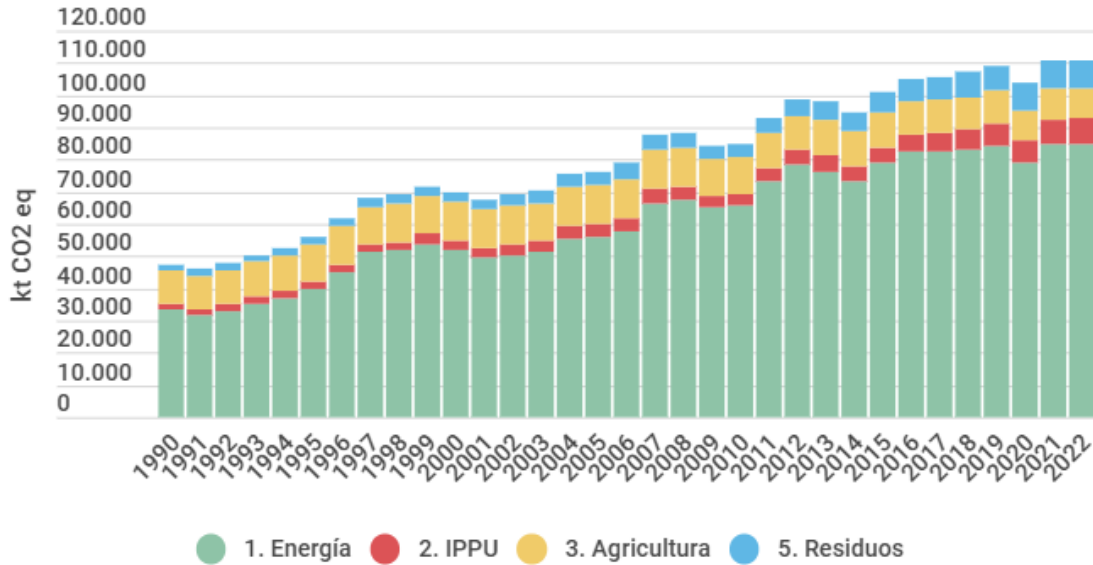


Figura 3.3: Emisiones de GEI totales (kt CO<sub>2</sub> eq) por sector, serie 1990-2022 [21]

### 3.3 Tecnologías de Captura de Carbono

Las tecnologías de Captura y Almacenamiento de Carbono (CCS) y la Captura Directa de Aire (DAC) se han consolidado como herramientas clave para alcanzar la neutralidad de carbono [4]. Estas tecnologías abordan diversas fuentes de emisiones y ofrecen soluciones tanto para descarbonizar sectores industriales como para generar emisiones negativas. El CCS es una opción eficaz para descarbonizar sectores difíciles de electrificar, como la producción de cemento y acero, y cuando se combina con bioenergía (BECCS), genera emisiones negativas. Estas tecnologías abarcan procesos para capturar, transportar, almacenar y utilizar CO<sub>2</sub> en diversas etapas de desarrollo, desde laboratorios hasta escalas comerciales. Los Modelos de Evaluación Integrada proyectan que se podrían capturar hasta 3050 Gt de CO<sub>2</sub> para 2100, contribuyendo a limitar el calentamiento global a 2°C. Sin embargo, el despliegue actual de estas tecnologías está por debajo de las necesidades, debido a barreras económicas, técnicas y sociales. Aunque se han logrado avances en la captura post-combustión y el uso de membranas poliméricas para capturar CO<sub>2</sub> directamente del aire, muchos proyectos aún se encuentran en fases de demostración. Las barreras incluyen la falta de políticas de apoyo adecuadas, los altos costos de infraestructura y la necesidad de una inversión significativa para avanzar de las fases de demostración (TRL 7) hacia la comercialización (TRL 9) [18].

La Captura Directa de Aire (DAC) se perfila como una solución prometedora para abordar las emisiones de CO<sub>2</sub> de fuentes difusas, como la atmósfera. A diferencia de las tecnologías tradicionales

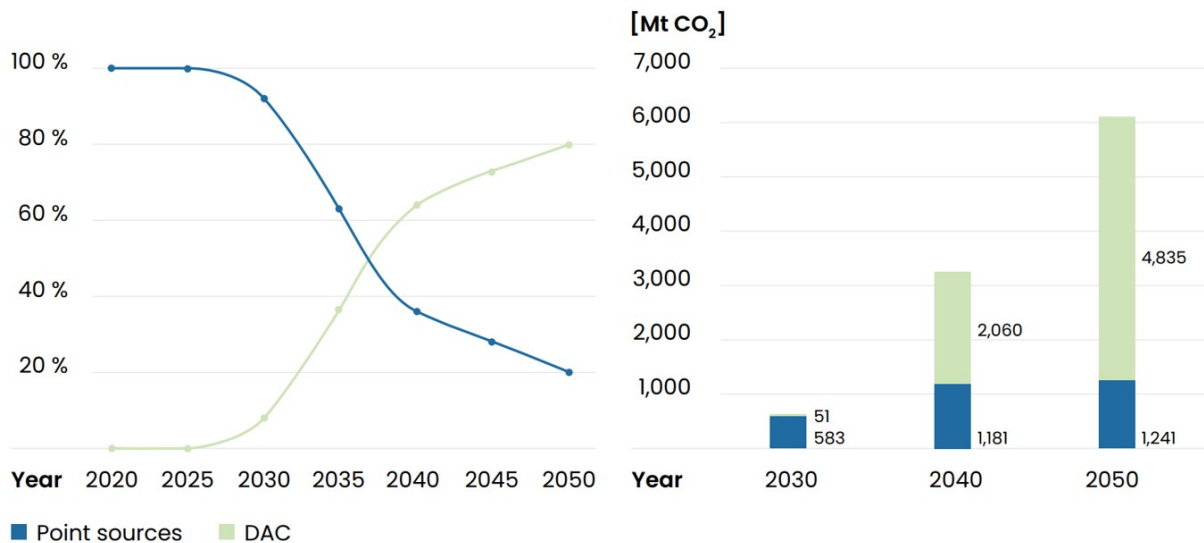


Figura 3.4: Demanda de CO<sub>2</sub> cubierta por fuentes puntuales y DAC durante la transición de 2020 a 2050 [8].

de captura y almacenamiento de carbono (CCS), la DAC es independiente de la ubicación de las emisiones, lo que la convierte en una estrategia clave dentro del esfuerzo global por descarbonizar la economía. Su compatibilidad con energías renovables (eólica, solar, geotérmica) es fundamental: al operar con electricidad o calor renovable, la DAC evita generar emisiones adicionales durante la captura, lo que la convierte en una tecnología de emisiones negativas netas. Esto es crítico, ya que un sistema DAC alimentado con combustibles fósiles podría emitir más CO<sub>2</sub> del que captura, comprometiendo su propósito climático. Además, la captura DAC permite reducir directamente las concentraciones atmosféricas de CO<sub>2</sub> y ofrece un almacenamiento estable (ej.: mineralización o almacenamiento geológico), al considerar el CO<sub>2</sub> atmosférico como una fuente inagotable, se vislumbra la posibilidad de utilizarlo como materia prima para la producción de combustibles sintéticos, contribuyendo así a un sistema energético más sostenible. El papel crucial de la DAC se evidencia en proyecciones para el año 2050, donde se espera que esta tecnología suministre hasta el 80% de la demanda global de CO<sub>2</sub> necesaria para la síntesis de combustibles, alcanzando una capacidad de captura anual de 4.835 megatoneladas de CO<sub>2</sub> como se puede observar en la Figura 3.4 [8]. Este crecimiento del mercado destaca la importancia de superar los desafíos actuales relacionados con los costos y la escalabilidad. La captura de carbono tiene el potencial de acelerar la transición hacia la carbono neutralidad, consolidándose como un pilar esencial en el cumplimiento de los objetivos climáticos globales.

Las plantas industriales representan una fuente importante de emisiones de CO<sub>2</sub>, con procesos como la producción de acero, cemento, refinación de petróleo y producción de hidrógeno, donde

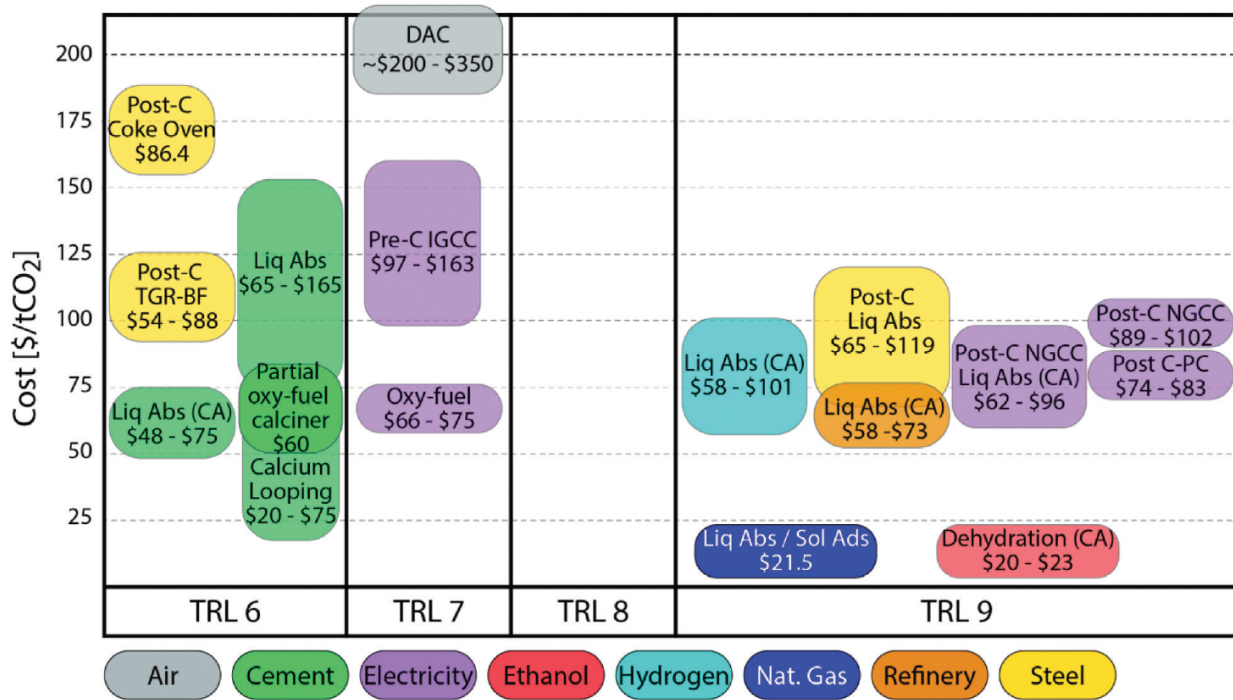


Figura 3.5: Costos de captura de CO<sub>2</sub> en plantas industriales y su nivel de madurez tecnológica (TRL) [15].

las tecnologías de captura varían en enfoque y costos. La captura postcombustión, la más extendida, separa el CO<sub>2</sub> de los gases de escape mediante solventes amínicos como la MEA o sorbentes sólidos, mientras que la oxidación quema combustibles en oxígeno puro para generar flujos concentrados de CO<sub>2</sub> (>90%), facilitando su captura. Alternativamente, la precombustión transforma el combustible fósil en syngas (H<sub>2</sub> + CO) antes de su uso, eliminando el CO<sub>2</sub> mediante procesos químicos. Estos métodos presentan distintos niveles de madurez (TRL) y costos: desde \$65–119/tCO<sub>2</sub> en la industria del acero con solventes amínicos hasta \$65–165/tCO<sub>2</sub> en la producción de cemento, variando según eficiencia, incentivos fiscales y economías de escala, como se detalla en la Figura 3.5 [15].

Este análisis se complementa con el análisis de Sherwood [22], el cual demuestra que a medida que disminuye la concentración de CO<sub>2</sub> en la corriente de gas, los costos de separación aumentan. Este análisis, desarrollado originalmente por Thomas K. Sherwood en 1959 al investigar la relación entre la concentración de un metal en un mineral y su costo de extracción, fue posteriormente extendido al CO<sub>2</sub> en corrientes gaseosas. La Figura 3.6 ilustra esta relación, mostrando cómo los costos de captura, calculados a partir del modelo IECM (Integrated Environmental Control Model) de Ed Rubin, aumentan a medida que disminuye la concentración inicial del CO<sub>2</sub>. Los puntos de datos representan diferentes tecnologías de separación, donde tecnologías como la absorción química

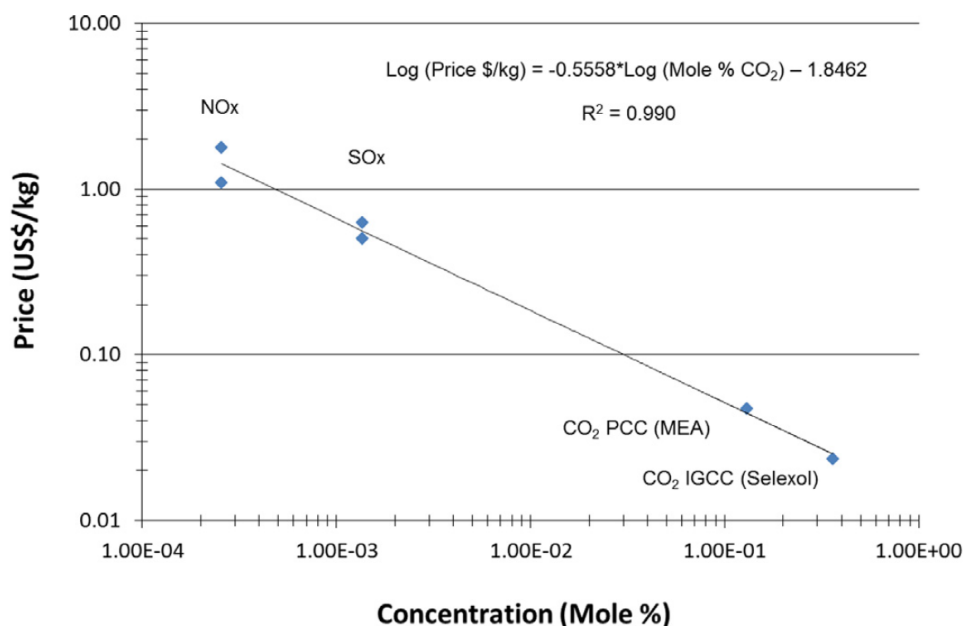


Figura 3.6: Gráfica de Sherwood para distintas tecnologías de separación de gases [22].

con MEA (que usa monoetanolamina para reaccionar químicamente con el CO<sub>2</sub>), la absorción física con Selexol (que emplea un solvente orgánico para capturar CO<sub>2</sub> por solubilidad) y los procesos de desulfurización y reducción catalítica (que eliminan contaminantes antes de la captura) siguen la misma tendencia. Esta relación es independiente de la tecnología utilizada y se puede expresar mediante una ecuación lineal que relaciona los costos logarítmicos de captura con la concentración logarítmica de la sustancia objetivo [22].

La captura DAC es una tecnología clave para limitar el calentamiento global a 1.5 °C, pero su implementación enfrenta desafíos energéticos críticos. Dada la baja concentración de CO<sub>2</sub> (420 ppm), el proceso requiere un mínimo teórico de 19 – 22 kJ/molCO<sub>2</sub>, aproximadamente cuatro veces más que en fuentes puntuales, donde se necesita entre 4.6 – 5.6 kJ/molCO<sub>2</sub> [15]. Esta demanda energética se suple principalmente mediante (1) electricidad para operar ventiladores y bombas, y (2) energía térmica que varía de 80 °C a 100 °C para sorbentes sólidos, y hasta 900 °C para solventes líquidos. Los costos actuales de DAC, que oscilan entre 100 USD/CO<sub>2</sub> y 1000 USD/CO<sub>2</sub>, reflejan esta dependencia. Sistemas con solventes líquidos, con costos de 147 USD/CO<sub>2</sub> a 264 USD/CO<sub>2</sub>, suelen utilizar combinaciones de electricidad y gas natural, mientras que los sistemas con sorbentes sólidos presentan un rango de costos de 88 USD/CO<sub>2</sub> a 228 USD/CO<sub>2</sub> y pueden acoplarse a energías renovables, como es el caso de la planta Orca de ClimeWorks en Islandia, que emplea energía geotérmica. No obstante, incluso con fuentes renovables, los requerimientos de tierra, que varían entre 1 – 10 km<sup>2</sup>/CO<sub>2</sub>/año, y la intermitencia de energías como la solar y eólica persisten como

barreras para la escalabilidad, como se detalla en la Tabla 3.1 [15]. .

Tabla 3.1: Costos estimados para captura directa de aire de acuerdo a la fuente energética [15].

<b>Tipo de Tecnología</b>	<b>Fuente de Energía</b>	<b>Costo de Captura</b> [\$/ $tCO_2$ ]	<b>Notas Adicionales</b>
Solvente Líquido	Gas Natural	147-264	Captura con energía térmica y eléctrica proveniente del gas natural. Emisiones de $CO_2$ debido al consumo energético: 0.47-0.66 $MtCO_2$ emitidas/año.
Solvente Líquido	Carbón + Gas Natural	147-264	Utiliza carbón y gas natural como fuentes de energía térmica y eléctrica.
Solvente Líquido	Energía Eólica + Gas Natural	141-265	Combinación de energía eólica para electricidad y gas natural para energía térmica, reduciendo las emisiones totales.
Solvente Líquido	Energía Solar + Gas Natural	141-265	Uso de energía solar para electricidad combinada con gas natural para energía térmica.
Solvente Líquido	Nuclear + Gas Natural	154-279	Uso de energía nuclear para electricidad junto con gas natural para energía térmica.
Solvente Líquido	PV + $H_2$ (Cero carbono)	317-501	Uso de electrólisis para producir $H_2$ , con requerimiento de 0.57 $tH_2O/tCO_2$ capturado.
Sorbente Sólido	Gas Natural	124-407	Energía requerida: 0.15-0.31 $MWh/tCO_2$ (eléctrica) y 3.4-4.8 $GJ/tCO_2$ (térmica).
Sorbente Sólido	Energía Solar	89-256	Alternativa viable si se usa solar para electricidad y gas natural para energía térmica, con costos más bajos debido a su menor intensidad de carbono.
Sorbente Sólido	Energía Eólica	113-326	Combinación estimada de energía renovable (eólica/solar) con gas natural para energía térmica.

# Capítulo 4

## Marco Teórico

### 4.1 Captura Directa del Aire

La Captura Directa del Aire (DAC) es una técnica avanzada diseñada para extraer dióxido de carbono directamente de la atmósfera, evitando su reemisión y logrando así un efecto neto de emisiones negativas de CO<sub>2</sub>. Este proceso juega un papel crucial en la mitigación del cambio climático, especialmente cuando se alimenta con energías renovables (como solar, eólica o geotérmica), ya que reduce aún más su huella de carbono al eliminar la dependencia de combustibles fósiles. Las tecnologías DAC se asemejan a aquellas empleadas para capturar emisiones de fuentes puntuales, como plantas industriales o centrales termoeléctricas, pero están adaptadas para el aire atmosférico. Utilizan contactores aire-adsorbente, los cuales pueden ser mediante disolventes acuosos o adsorbentes sólidos. Posteriormente, se aplica calor para liberar el CO<sub>2</sub>, facilitando su compresión y transporte hacia sitios de almacenamiento [18]. Un aspecto fundamental de la tecnología de Captura Directa de Aire con adsorbentes sólidos (S-DAC) es el uso de sorbentes sólidos para capturar CO<sub>2</sub> del aire ambiente a temperatura ambiente y presión atmosférica. El proceso implica la captura inicial de CO<sub>2</sub>, que luego se libera de los sorbentes a bajas presiones y temperaturas moderadas (80-100°C) a través de un proceso de oscilación térmica al vacío. Este ciclo de adsorción y desorción permite una captura continua de CO<sub>2</sub> del aire, resultando en la obtención de CO<sub>2</sub> puro que puede ser utilizado o almacenado [23]. Cuando el sistema opera con energías renovables, la eficiencia ambiental del proceso se maximiza, asegurando que toda la cadena de captura sea sostenible. Un diagrama esquemático de este proceso se muestra en la Figura 4.1.

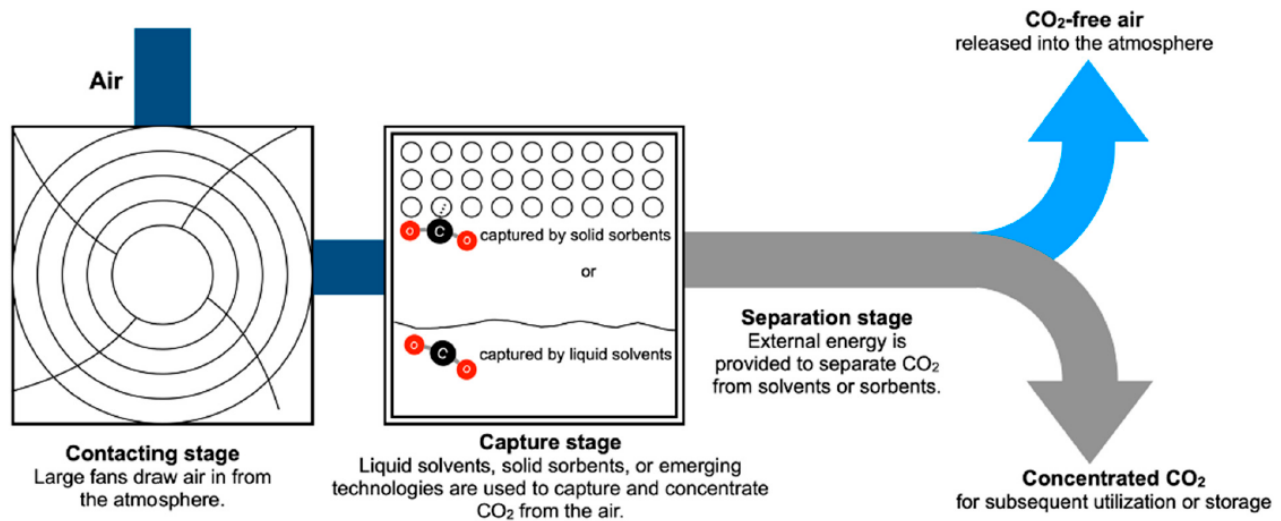


Figura 4.1: Diagrama esquemático de la captura de carbono directamente del aire [23]

#### 4.1.1 Plantas DAC en funcionamiento

Actualmente, existen 15 plantas de DAC de pequeña escala en operación en Estados Unidos, Europa y Canadá. Han extraído con éxito miles de toneladas de CO<sub>2</sub> por año [24]. Estados Unidos es el país líder a nivel global en gestión de carbono, incentivando la captura directa del aire (DAC) a través del crédito fiscal 45Q, que paga hasta 50 dólares por tonelada de CO<sub>2</sub> almacenado. Reformado en 2018, este crédito ha impulsado proyectos de captura de carbono. En 2021, la Ley de Inversiones en Infraestructuras y Empleos (IIJA) proporcionó financiación para la expansión de la infraestructura de transporte y almacenamiento de CO<sub>2</sub>. El Departamento de Energía lidera el programa Carbon Negative Shot y ha destinado 14,5 millones de dólares a estudios para sistemas DAC. Además, que busca mejorar el crédito 45Q, incrementándolo a 180 dólares por tonelada y ampliando su alcance hasta 2032 [25]. En cambio, en Europa la gestión del carbono ha sido más lenta que en Estados Unidos, esto debido a la falta de un marco político sólido y de financiación para el desarrollo de sectores de almacenamiento de CO<sub>2</sub>. Sin embargo, debido a recientes cambios como la inclusión del CO<sub>2</sub> en la red transeuropea de energía y el apoyo del Fondo de Innovación de la UE a proyectos de captura de carbono, es que existen avances. A pesar de esto, la captura directa de aire no está contemplada en los objetivos climáticos europeos para 2030, lo que dificulta su viabilidad comercial. Iniciativas como el Mecanismo de Certificación de Eliminación de Carbono (CR CM) podrían proporcionar un marco regulatorio que impulse la DAC, pero será necesario integrar la eliminación de carbono en los objetivos de la UE para 2040 y 2050 [25].

Empresas como Climeworks, Global Thermostat y Carbon Engineering lideran el desarrollo

de plantas DAC, con plantas relativamente pequeñas y que se concentran mayoritariamente en Europa. La mayor planta operativa se encuentra en Islandia por parte de la empresa Climeworks, que entró en operación en otoño de 2021, eliminando hasta 4.000 toneladas de CO<sub>2</sub> al año. Este CO<sub>2</sub> capturado se almacena permanentemente mediante mineralización (mezclándolo con agua e inyectándolo en formaciones basálticas, donde se solidifica en roca) o se reutiliza en aplicaciones industriales, como combustibles sintéticos o fertilizantes. Para mitigar los efectos más graves del cambio climático, es crucial aumentar rápidamente la capacidad de reducción de CO<sub>2</sub>. La empresa norteamericana Carbon Engineering planea tres instalaciones capaces de eliminar hasta un millón de toneladas de CO<sub>2</sub> al año, destinadas principalmente a almacenamiento geológico profundo o uso en combinación con hidrógeno para producir combustibles neutros en carbono. Más proyectos a gran escala están en desarrollo. En Estados Unidos, el IJA ha financiado cuatro centros de captura directa de aire, impulsando la innovación y reducción de costos a través de infraestructura compartida. Con el creciente interés del capital privado y la posible mejora del crédito 45Q, el impacto de esta tecnología podría ser significativo [25]. Las Tablas 4.1 y 4.2 resumen las capacidades operativas y en desarrollo de varios proyectos de captura de CO<sub>2</sub> a nivel mundial.

Tabla 4.1: Proyectos de captura directa de CO<sub>2</sub> en Norte América [23]

<b>Proyecto</b>	<b>Ubicación</b>	<b>Compañía Operativa</b>	<b>Capacidad de Captura</b>	<b>Utilización y Almacenamiento</b>
STRAROS DAC1	Cuenca Pérmica, Texas	PointFive y Carbon Engineering	1.0 Mt CO <sub>2</sub> /año	Almacenamiento geológico
Proyecto Oxy-CE Kleberg County	Región de la Costa del Golfo, Texas, EE.UU.	PointFive y Carbon Engineering	30 Mt CO <sub>2</sub> /año	Almacenamiento geológico
Proyecto HIF eFuels Matogorda County	Condado de Matogorda, Texas, EE.UU.	Highly Innovative Fuels (HIF) y Baker Hughes	25 Mt CO <sub>2</sub> /año	Producción de eFuel
Proyecto Basin	Wyoming, EE.UU.	CarbonCapture y Frontier Carbon Solutions	Escala de 5 Megatonnes	Almacenamiento en acuífero salino profundo
Proyecto Adams County	Colorado, EE.UU.	Global Thermostat	1000 toneladas CO <sub>2</sub> /año	Productos de valor agregado
Instalación de I+D DAC	Squamish, Columbia Británica, Canadá	Carbon Engineering	1 Mt CO <sub>2</sub> /año	Producción de combustible

Tabla 4.2: Proyectos de captura directa de CO<sub>2</sub> en Europa [23]

Proyecto	Ubicación	Compañía Operativa	Capacidad de Captura	Utilización y Almacenamiento
Proyecto DAC Noreste de Escocia	Reino Unido	Storegga y Carbon Engineering	500.000 a 1.000.000 toneladas de CO <sub>2</sub> /año	Almacenamiento geológico
Proyecto DAC Kollsnes	Noruega	Carbon Removal, Carbon Engineering y Oxy Low Carbon Ventures	500.000 a 1.000.000 toneladas de CO <sub>2</sub> /año	Almacenamiento geológico en el mar
Capricorn	Hinwil, Suiza	Climeworks	Varios cientos de toneladas de CO <sub>2</sub> /año	Fertilización de vegetales e industria de bebidas
Arctic Fox	Hellishidi, Islandia	Climeworks	50 toneladas de CO <sub>2</sub> /año	Almacenamiento geológico
Orca	Hellisheidi, Islandia	Climeworks	4.000 toneladas de CO <sub>2</sub> /año	Almacenamiento geológico
Mammoth	Hellisheidi, Islandia	Climeworks y Carbfix	36.000 toneladas de CO <sub>2</sub> /año	Almacenamiento geológico

### 4.1.2 Tecnologías disponibles

En el proceso de captura directa de CO<sub>2</sub> atmosférico (DAC), la selección de sorbentes sólidos es crucial para la eficiencia del sistema, y muchas tecnologías modernas optan por estos sorbentes debido a sus ventajas energéticas. Por ejemplo, Climeworks utiliza un sistema de adsorción por oscilación térmica y de vacío (TVSA), que opera en condiciones cercanas al vacío para facilitar la desorción del CO<sub>2</sub> capturado. En contraste, Carbon Engineering implementa un proceso de absorción química con hidróxido acuoso (hidróxido de potasio, KOH), el cual se regenera a 674°C en un calcinador. Si bien los procesos basados en aminas, como las soluciones de monoetanolamina (MEA), ofrecen condiciones de regeneración más suaves (120°C), aún no están establecidos comercialmente para DAC [26]. Tanto Climeworks como Global Thermostat emplean un polímero funcionalizado con amina como adsorbente; sin embargo, utilizan métodos distintos para la regeneración: la oscilación de temperatura al vacío (TVSA) en el caso de Climeworks y la oscilación de temperatura asistida por vapor (S-TSA) para Global Thermostat. En general, aunque los procesos basados en MEA

podrían ser efectivos en ambientes húmedos, podrían requerir una reposición excesiva de agua en condiciones de baja humedad relativa [26].

Comparando las tecnologías actuales, la captura de carbono mediante solventes líquidos (L-DAC) presenta un alto consumo energético y requiere equipos resistentes a la corrosión. En cambio, la captura mediante solventes sólidos (S-DAC) enfrenta complejidades en la construcción de plantas y altos costos de inversión. Por otro lado, las tecnologías emergentes como ESA (Electrochemical CO<sub>2</sub> Capture), MSA (Moisture-Sensitive Adsorption) y m-DAC (Membrane Direct Air Capture) muestran un gran potencial a pesar de estar aún en fase de investigación, con aplicaciones limitadas a gran escala. Estas tecnologías destacan por su eficiencia en el consumo energético y su simplicidad operativa, lo que las posiciona como opciones viables para el futuro. La Tabla 4.3 resume las tecnologías de adsorción en DAC y sus respectivas ventajas y desventajas.

Tabla 4.3: Tecnologías existentes de captura de carbono directa de aire [23]

<b>Tecnología</b>	<b>Principio</b>	<b>Material Comúnmente Empleado</b>	<b>Ventaja</b>	<b>Desventaja</b>
L-DAC	Disolvente líquido captura CO <sub>2</sub> formando carbonatos y lo libera al calentarse.	Soluciones alcalinas	Operación a gran escala; bajo costo.	Alta temperatura; alto consumo energético.
S-DAC	Sorbente sólido captura CO <sub>2</sub> a temperatura y presión ambientales, lo libera en condiciones de vacío.	Sorbentes a base de aminas	Modular y escalable; menor consumo energético.	Operaciones por lotes; altos costos de construcción.
ESA	Celda electroquímica que modula carga para adsorción y desorción de CO <sub>2</sub> .	Celda electroquímica	Eficiente en espacio; bajo consumo energético.	Altos costos de inversión.
MSA	Sorbentes que capturan CO <sub>2</sub> en condiciones secas y lo liberan en condiciones húmedas.	Resinas de intercambio iónico	Bajo consumo energético; integración con energías limpias.	Requiere mucha agua; sensible a condiciones climáticas.
m-DAC	Membranas que separan y capturan CO <sub>2</sub> del aire.	Membranas compuestas ultrafinas	Bajo consumo energético; bajo impacto ambiental.	Bajo rendimiento; altos costos de materiales.

Investigaciones han demostrado que la humedad es un factor crítico que afecta la eficiencia de captura [27]. En procesos de captura DAC, la capacidad de CO<sub>2</sub> del sorbente disminuye con la

temperatura, lo que hace que la productividad sea mayor a bajas temperaturas ambiente. A medida que aumenta la humedad, la capacidad del sorbente también incrementa, especialmente a bajas temperaturas ( $<30^{\circ}\text{C}$ ), debido a que el agua adsorbida ( $\text{H}_2\text{O}$ ) actúa como mediador: reacciona con el  $\text{CO}_2$  en sitios activos (como grupos amínicos) para formar bicarbonatos, mejorando así la captura. Sin embargo, este efecto se invierte a temperaturas superiores a  $30^{\circ}\text{C}$ , donde la humedad excesiva compite con el  $\text{CO}_2$  por los mismos sitios activos del sorbente, reduciendo su eficiencia. Además, a altas temperaturas, el agua adsorbida requiere más energía para ser removida durante la regeneración del sorbente, aumentando el consumo energético total [28]. Este balance entre temperatura y humedad explica por qué condiciones frías y húmedas son ideales para la adsorción, mientras que en ambientes cálidos y húmedos la productividad disminuye. La Figura 4.2 representa la distribución de temperatura mensual y la humedad para distintos proyectos de captura DAC, ilustrando estas interacciones clave.

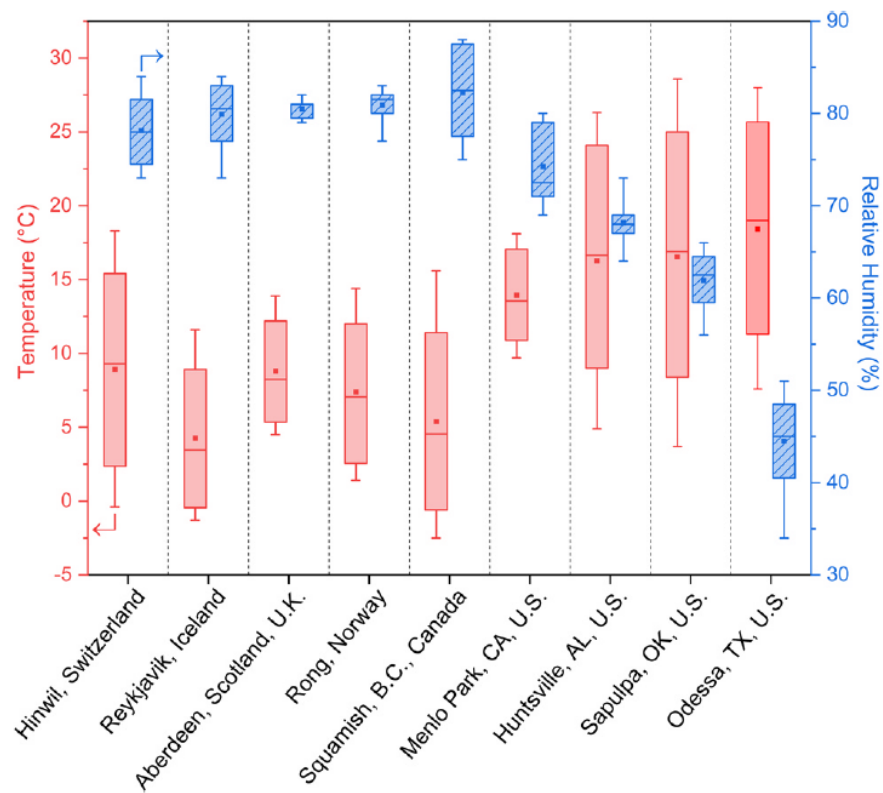


Figura 4.2: Descripción general de la distribución de la temperatura media mensual y la humedad relativa de diferentes ubicaciones de proyectos DAC [26].

Actualmente, las estimaciones de los costos para DAC oscilan entre los 200 y 600 USD por tonelada de  $\text{CO}_2$ . Sin embargo, investigaciones recientes sugieren que el costo de las plantas en el futuro podría caer por debajo de los 100 USD por tonelada de forma más rápida, teniendo

un mercado del uso del carbono que puede ayudar a compensar los costos. Los mayores gastos operativos de las instalaciones DAC se asocian al consumo de energía de la planta, específicamente, el soplado y la ventilación de aire donde se requieren grandes cantidades de energía para su operación [24].

## 4.2 Contactores Aire - Adsorbente

Los contactores aire-adsorbente son elementos esenciales en los sistemas de captura de gases, cuyo objetivo principal es maximizar la transferencia de masa entre el aire y el adsorbente para retener compuestos no deseados como el  $\text{CO}_2$ . Estos contactores están diseñados para optimizar el área de contacto entre el fluido y el material adsorbente, lo que mejora la eficiencia del proceso de adsorción. Existen varios tipos de contactores, entre los cuales se destacan monolitos y pellets. Los monolitos son estructuras sólidas y rígidas compuestas por canales paralelos (circulares, hexagonales, cuadrados, triangulares, etc.), lo que les permite una alta permeabilidad y una baja caída de presión, favoreciendo la difusión de gases y la transferencia de masa. Su diseño con una alta relación de aspecto mejora la capacidad de difusión de los gases, optimizando el rendimiento del proceso de adsorción. Los pellets, por otro lado, son pequeñas partículas o gránulos que, al estar hechos de materiales adsorbentes, proporcionan una gran capacidad de adsorción gracias a su estructura porosa. Estos contactores son esenciales en aplicaciones industriales como la captura de  $\text{CO}_2$ , garantizando alta eficiencia y estabilidad en procesos como la captura directa de aire o la descontaminación de gases industriales [29, 30, 31].

En el ámbito de la captura directa de aire, los lechos conformados por monolitos se consolidan como una tecnología clave, superando muchas de las limitaciones asociadas a los pellets. Aunque los pellets son ampliamente utilizados debido a su versatilidad, enfrentan desafíos como mayores resistencias a la transferencia de masa y caídas de presión significativas, lo que afecta negativamente la eficiencia del proceso. Además, la funcionalización de los pellets, necesaria para mejorar su rendimiento, puede reducir su capacidad de adsorción y complicar los procedimientos de regeneración térmica, incrementando los costos operativos y acortando su vida útil [32]. En contraste, los monolitos optimizan la transferencia de masa, minimizan la capacidad térmica y reducen el consumo energético. Además, los monolitos cerámicos, como los de cordierita, que son los más utilizados en captura DAC, pueden fabricarse utilizando tecnologías existentes de convertidores catalíticos automotrices, facilitando su escalabilidad industrial para procesos de captura DAC.

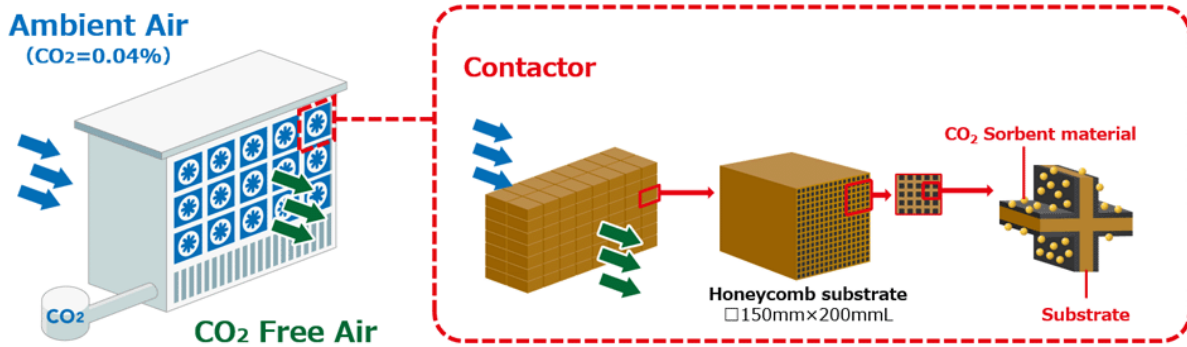


Figura 4.3: Captura de carbono DAC mediante contactores monolíticos

A continuación, en la Tabla 4.4 se presenta una comparación entre el rendimiento de los pellets y monolitos de cerámica en aplicaciones DAC [33].

Tabla 4.4: Comparación entre sorbentes en forma de pellets y estructura de panel [33].

Comparación de sorbentes		
Parámetro	Pellets	Monolitos de Panel
Precondiciones	<p>Φ100mm</p> <p>100mmL</p> <p>Φ1.4mm Material : SiO<sub>2</sub> Bulk Density : 2.2 g/cm<sup>3</sup> Specific Heat : 0.75 J/g·K</p>	<p>Φ100mm</p> <p>100mmL</p> <p>Wall Thickness 0.1mm Cell Size 1.27mm Material : Cordierite Bulk Density : 2.6 g/cm<sup>3</sup> Specific Heat : 0.73 J/g·K</p>
Pérdida de presión	1	0.02 (1/50 de los pellets)
Capacidad calorífica	1	0.33 (1/3 de los pellets)

#### 4.2.1 Materiales adsorbentes para la captura de carbono

Las propiedades de los materiales adsorbentes son fundamentales para la eficiencia del proceso de separación de gases, en este caso para el dióxido de carbono. Los adsorbentes sólidos, ampliamente utilizados en sistemas de captura de CO<sub>2</sub>, presentan una variedad de estructuras y características que influyen en su rendimiento. Generalmente, estos adsorbentes se presentan en forma granular, con tamaños que varían desde los 12 mm de diámetro hasta partículas pequeñas de 50 μm. Para

ser eficaces, los adsorbentes deben poseer una consistencia adecuada que les permita mantener su integridad estructural durante la manipulación y soportar el peso de los lechos necesarios en los procesos de adsorción [34]. Para una visión general de los diferentes tipos de materiales adsorbentes utilizados en la captura de  $\text{CO}_2$ , se presenta el diagrama de la Figura 4.4 [35].

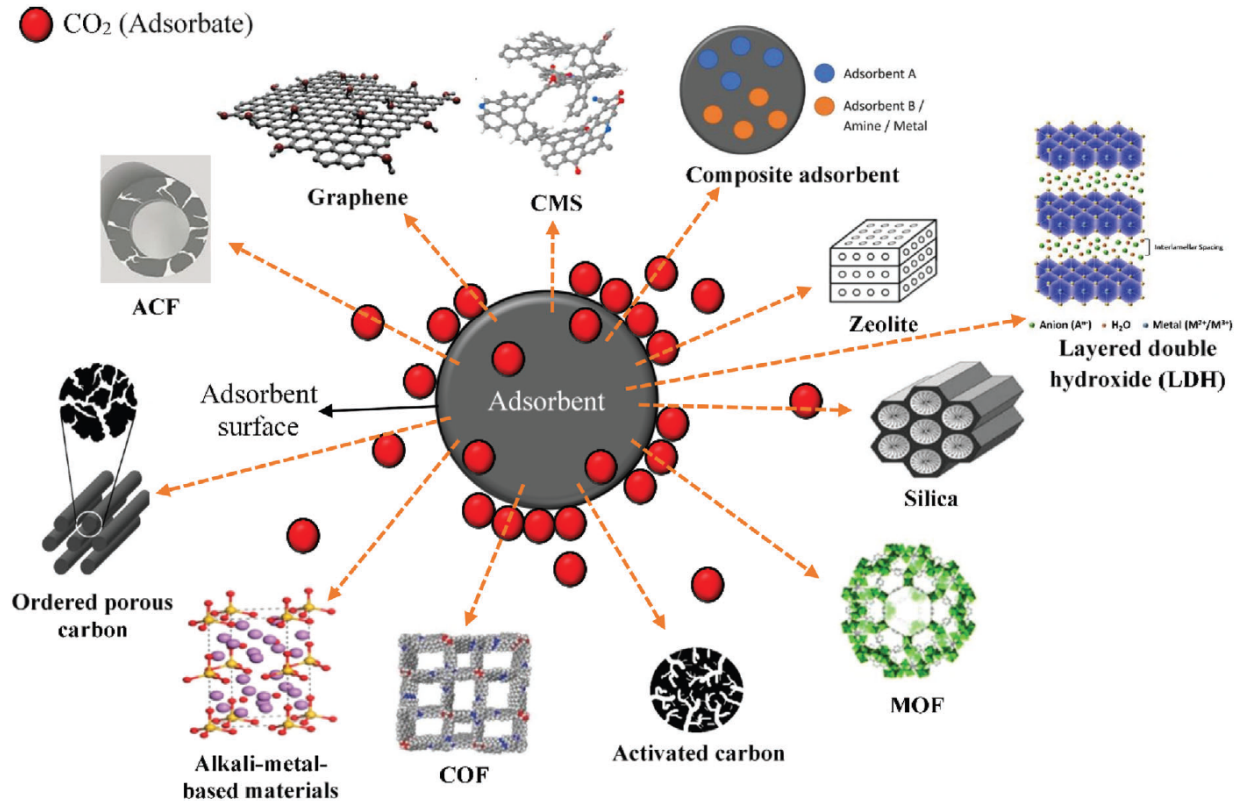


Figura 4.4: Materiales adsorbentes para captura de  $\text{CO}_2$  [35].

Sin embargo, entre los materiales adsorbentes más comunes para la captura de  $\text{CO}_2$  destacan las zeolitas, los materiales basados en carbono, las sílicas mesoporosas y los MOFs (Metal-Organic Frameworks). En la Tabla 4.5, se resumen sus principales características, ventajas y desventajas, proporcionando una perspectiva comparativa de su aplicabilidad en procesos de captura de  $\text{CO}_2$ .

Las zeolitas destacan por su estructura porosa única, compuesta de aluminosilicatos hidratados, que al deshidratarse forman cavidades con diámetros de poro entre 3 y 10 Å. Esto las hace ideales para la adsorción de  $\text{CO}_2$ , especialmente en aplicaciones de separación en monolitos [29]. Sin embargo, su sensibilidad a la humedad y los altos requerimientos de temperatura para la regeneración son limitantes importantes. Por otro lado, los carbones activados, derivados de materiales naturales o residuales, ofrecen una alternativa de bajo costo con alta resistencia a la humedad. Su efectividad a altas presiones los hace ideales para procesos de post-combustión, y han

Tabla 4.5: Materiales adsorbentes para captura de CO<sub>2</sub> [36]

Material	Características Principales	Ventajas	Desventajas
Zeolitas	Cavidades con diámetros de poro entre 3 y 10 Å; estructura porosa compuesta de aluminosilicatos hidratados.	Alta capacidad de adsorción; ampliamente utilizadas en procesos PSA.	Sensibles a la humedad; requieren altas temperaturas para regeneración.
Sílica mesoporosa	Nanomateriales porosos que pueden ser funcionalizados químicamente para mejorar la adsorción de CO <sub>2</sub> .	Diseño flexible; mejora la selectividad para CO <sub>2</sub> .	Limitada estabilidad térmica; menor capacidad de adsorción comparada con MOFs.
MOFs (Metal-Organic Frameworks)	Mayor área superficial específica; estructura y función ajustables.	Alta capacidad y selectividad para CO <sub>2</sub> ; altamente investigados para captura y secuestro de carbono.	Alto costo de producción; sensibilidad a condiciones ambientales.
Carbones activados	Alta área superficial; derivados de materiales naturales o residuales.	Bajo costo; insensibles a la humedad; efectivos a altas presiones.	Menor capacidad de adsorción que zeolitas a bajas presiones.

sido ampliamente utilizados desde mediados del siglo XX en aplicaciones industriales de purificación de gases y tratamiento de aguas. En captura de CO<sub>2</sub>, su adopción ha crecido en las últimas décadas debido a su versatilidad y escalabilidad, especialmente en sistemas de post-combustión donde las condiciones de alta presión favorecen su uso. Además, la optimización del método de preparación, que puede ser mediante activación física o química, permite ajustar su porosidad y mejorar su rendimiento [37].

Para evaluar el desempeño de estos adsorbentes bajo diferentes condiciones operativas, se presenta la Figura 4.5 una comparación de sus capacidades de adsorción de CO<sub>2</sub> a diferentes temperaturas [35]. Como se observa, la eficiencia de adsorción varía significativamente en función del material, la temperatura y las condiciones de operación. Este análisis comparativo permite identificar los materiales más adecuados para aplicaciones específicas. Se observa que los carbones activados muestran una mayor capacidad de adsorción a bajas temperaturas y presiones moderadas, mientras que los MOFs destacan por su alta capacidad a presiones más elevadas. Además, la relación entre capacidad de adsorción y temperatura puede seguir patrones lineales, exponenciales o polinomiales, dependiendo del material y las condiciones, siendo los MOFs y los adsorbentes

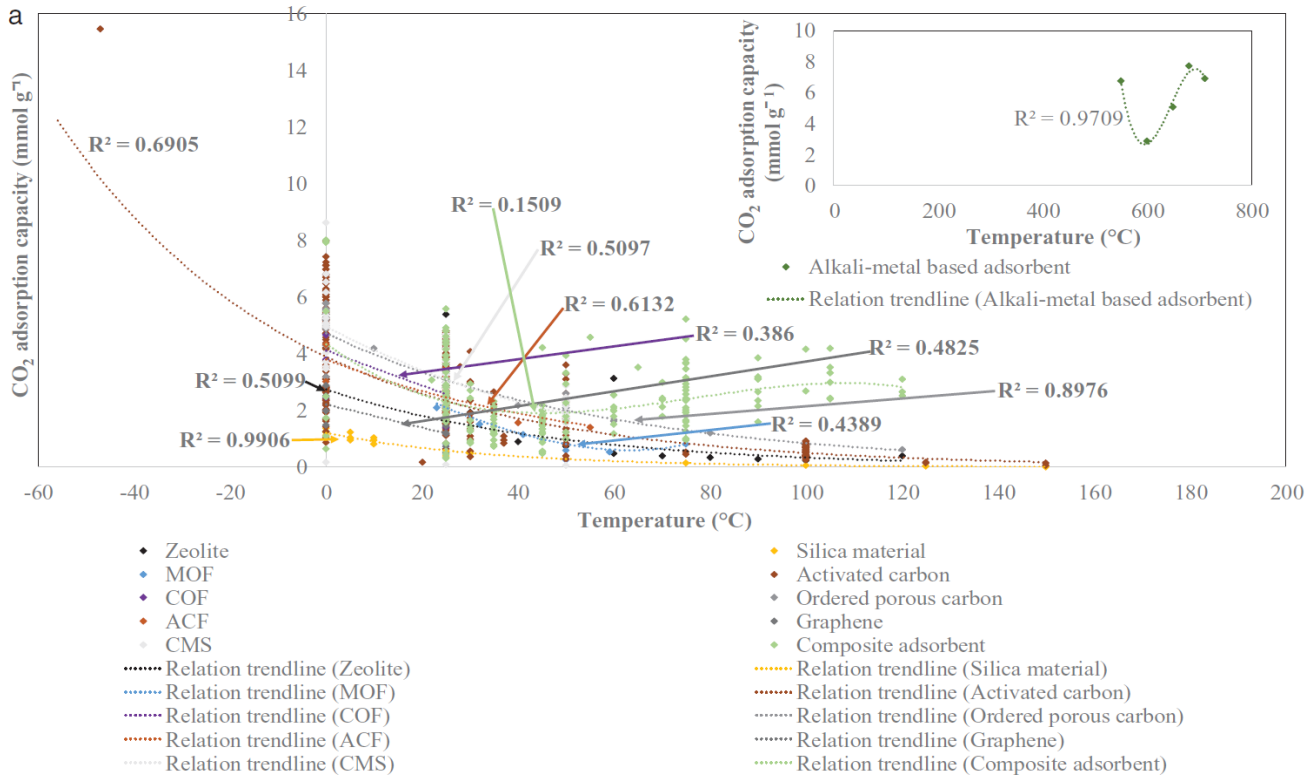


Figura 4.5: Capacidad de adsorción de CO<sub>2</sub> de varios adsorbentes y temperaturas (-47 a 710 °C) a presiones de 1 bar [35]

basados en metales alcalinos los que presentan las correlaciones más fuertes y tendencias ascendentes en ciertos rangos de presión y temperatura [35].

## 4.3 Métodos de Adsorción Industrial

### 4.3.1 Adsorción por oscilación de temperatura (TSA)

La adsorción por oscilación de temperatura (TSA) es un proceso ampliamente estudiado para la captura de CO<sub>2</sub> debido a su capacidad de utilizar energía térmica de baja calidad, como el calor residual de plantas de energía o gases de combustión, lo que reduce los costos operativos. Durante la fase de adsorción, el CO<sub>2</sub> presente en el gas fluye a través de un lecho de adsorbente a temperaturas bajas, donde se fija en la superficie del material debido a interacciones químicas, separándolo de otros componentes del gas. El equilibrio de adsorción es favorecido en condiciones

de menor temperatura y mayor presión, maximizando la captura de  $\text{CO}_2$ . En TSA, la regeneración del adsorbente generalmente se realiza calentando el lecho a temperaturas de entre  $120^\circ\text{C}$  y  $150^\circ\text{C}$ , utilizando métodos indirectos como chaquetas térmicas, resistencias eléctricas o fluidos calientes. Después del calentamiento, se aplica una purga breve con gases calientes como nitrógeno o aire a una temperatura de alrededor de  $100^\circ\text{C}$  a  $150^\circ\text{C}$ , lo que permite la desorción del  $\text{CO}_2$  [38]. En la Figura 4.6 se muestra un diagrama del proceso de adsorción por TSA.

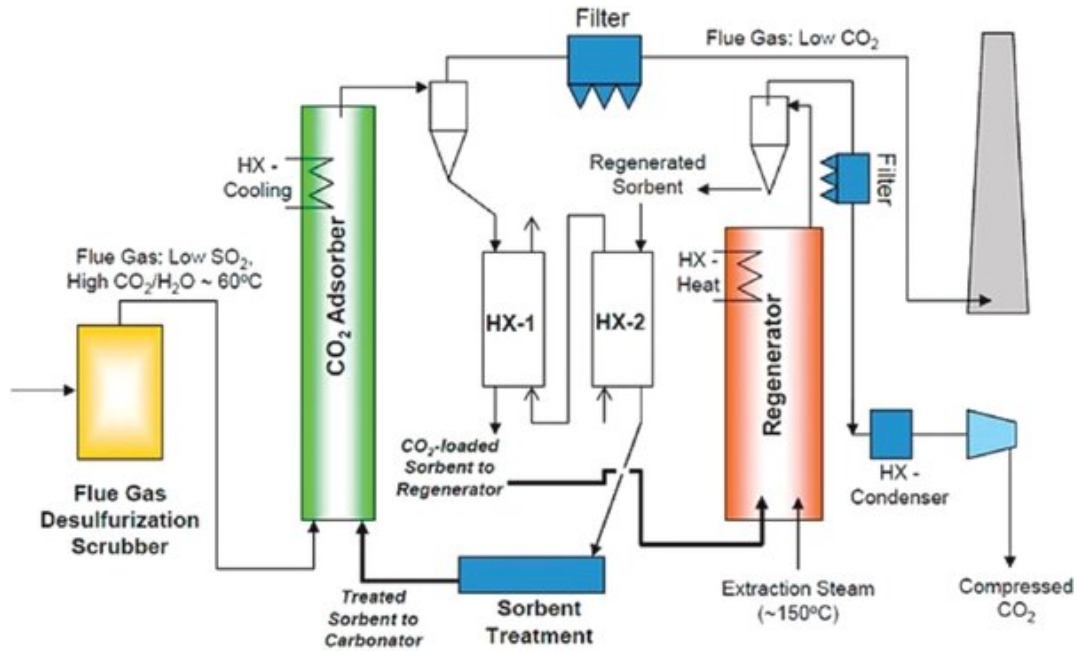


Figura 4.6: Diagrama de flujo de un sistema de captura de  $\text{CO}_2$  por adsorción por oscilación de temperatura (TSA) utilizando sorbentes sólidos [15].

Sin embargo, estos enfoques pueden diluir el  $\text{CO}_2$  recuperado y presentan desafíos de escalabilidad para lechos de gran tamaño (mayor a 2 metros de diámetro). Métodos alternativos, como la adsorción por oscilación eléctrica (ESA), generan calor directamente mediante corriente eléctrica a través de adsorbentes conductores, logrando una mayor eficiencia energética, aunque con limitaciones prácticas debido a la disponibilidad de materiales especializados [38].

### 4.3.2 Adsorción por oscilación de presión (PSA)

La adsorción por oscilación de presión (PSA) es un proceso cíclico diseñado para separar gases, como el  $\text{CO}_2$ , utilizando materiales adsorbentes porosos y variando periódicamente la presión en el sistema. Un ciclo básico de PSA incluye cuatro etapas principales: presurización, donde se

introduce la mezcla de gases en el lecho adsorbente y se aumenta la presión para que el material capture el  $\text{CO}_2$ ; adsorción, en la que el  $\text{CO}_2$  es retenido por el adsorbente mientras otros gases, como el  $\text{N}_2$ , atraviesan el lecho y se recolectan; despresurización, durante la cual se reduce rápidamente la presión, liberando el  $\text{CO}_2$  capturado para su recolección; y purgado, que consiste en un flujo contracorriente de gas inerte a baja presión para eliminar cualquier residuo de  $\text{CO}_2$  y regenerar el material para el siguiente ciclo. Este proceso es eficiente para separaciones de  $\text{CO}_2$  en mezclas gaseosas y se basa en materiales como carbones activados, zeolitas y MOFs, seleccionados por su alta afinidad hacia el  $\text{CO}_2$ . Los parámetros clave de desempeño incluyen la pureza del gas separado, la recuperación de  $\text{CO}_2$  y la productividad del sistema [39]. La Figura 4.7 muestra un esquema del proceso de adsorción por PSA.

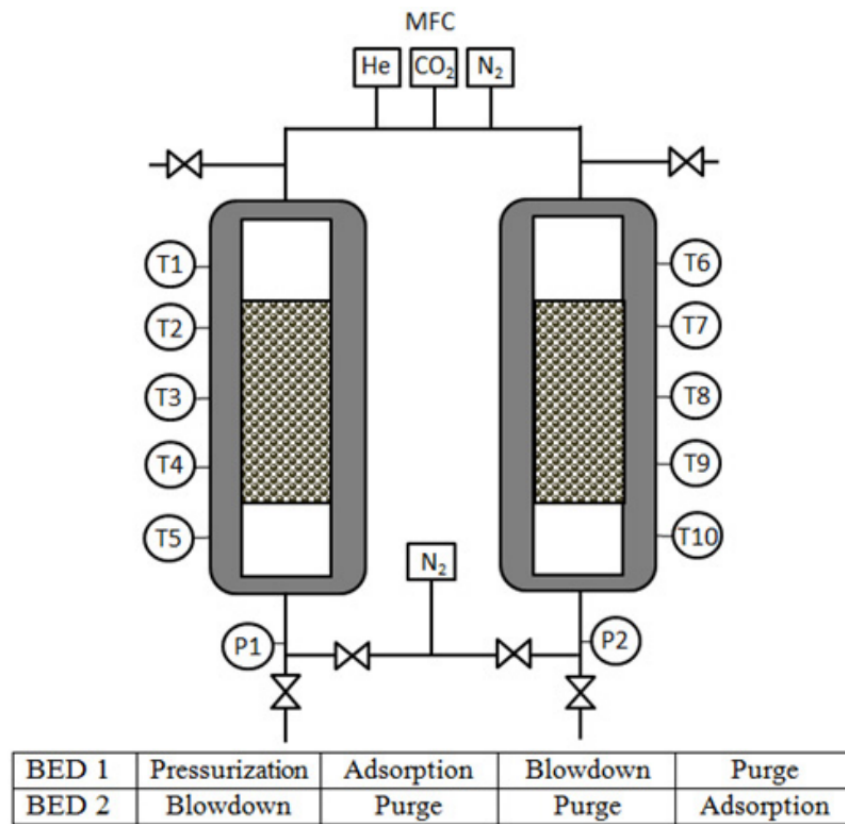


Figura 4.7: Esquema de un sistema de captura de  $\text{CO}_2$  por adsorción por oscilación de presión (PSA) [39].

### 4.3.3 Adsorción por oscilación de presión al vacío (VPSA)

La Adsorción por Oscilación de Presión al Vacío (VPSA) es una técnica avanzada para capturar  $\text{CO}_2$  de mezclas de gases, que utiliza adsorbentes sólidos y un ciclo de desorción al vacío para regenerar el material y liberar el gas capturado. VPSA se distingue por operar a presiones más bajas y consumir menos energía en comparación con otros métodos, como la absorción con aminas. Este proceso es particularmente útil para aplicaciones industriales debido a su eficiencia y flexibilidad para manejar diversas condiciones operativas. Aunque enfrenta desafíos como el consumo energético y la resistencia al transporte de masa, el desarrollo de adsorbentes estructurados, como monolitos de carbono, ha mejorado su capacidad, reduciendo la caída de presión y permitiendo altas tasas de captura y recuperación de  $\text{CO}_2$  con purzas superiores al 95%. Estudios recientes han optimizado configuraciones y materiales para hacer de VPSA una opción más viable en la captura de  $\text{CO}_2$  a gran escala [40]. La Figura 4.8 muestra un esquema del proceso de adsorción por VPSA.

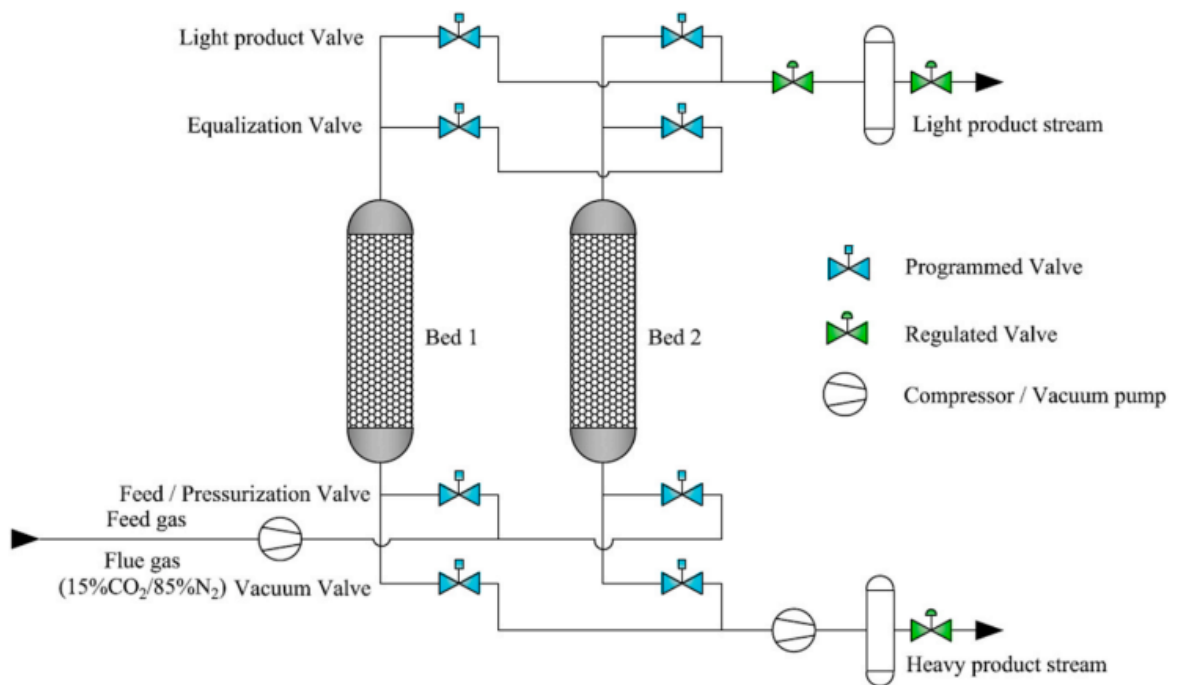


Figura 4.8: Diagrama esquemático del proceso VPSA de dos lechos [40].

#### 4.3.4 Adsorción por oscilación de temperatura al vacío (TVSA)

La adsorción por oscilación de temperatura y vacío (TVSA) es un proceso avanzado para la captura de  $\text{CO}_2$ , particularmente relevante en tecnologías de captura directa de aire (DAC). Este método combina el uso de calor y vacío para superar las fuerzas de adsorción de  $\text{CO}_2$  en los adsorbentes, permitiendo su regeneración eficiente. En comparación con técnicas más simples como la adsorción por oscilación de temperatura (TSA) o por vacío (VSA), la TVSA mejora significativamente la pureza del  $\text{CO}_2$  capturado, incluso desde concentraciones bajas como las presentes en el aire. El ciclo TVSA típico incluye cuatro etapas: adsorción, despresurización, evacuación y presurización con producto liviano, aplicando un incremento de temperatura durante la evacuación para optimizar la liberación del  $\text{CO}_2$ . Esta técnica ha demostrado ser eficaz al utilizar adsorbentes como zeolitas con una alta selectividad para  $\text{CO}_2$  y capacidades de carga mejoradas, siendo clave para lograr puridades superiores al 99.5% en un solo ciclo [41]. La Figura 4.9 muestra un diagrama esquemático del proceso de adsorción por TVSA en 4 pasos de operación.

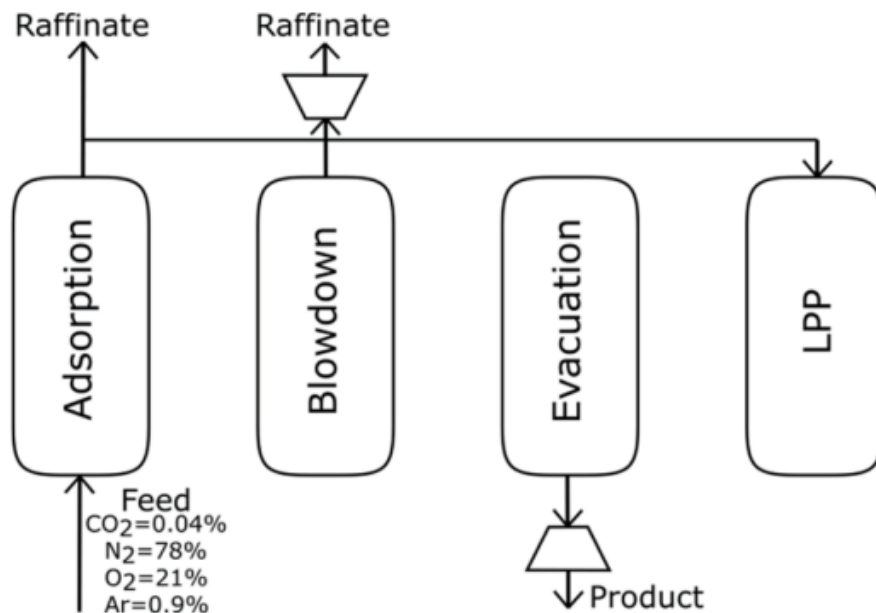


Figura 4.9: Diagrama esquemático junto con la representación gráfica de la temperatura y presión de un TVSA de 4 pasos [40].

## 4.4 Fundamentos de Adsorción de CO<sub>2</sub>

### 4.4.1 Principios de adsorción

La adsorción es un proceso fisicoquímico en el que átomos, iones o moléculas se adhieren a la superficie de un material sólido, formando una capa en la interfaz entre una fase gaseosa y una fase sólida, a diferencia de la absorción, donde la transferencia ocurre dentro del volumen de una sustancia. En la adsorción química o quimisorción, se forman enlaces químicos entre el adsorbente y el adsorbato, lo que genera un intercambio de electrones [34]. Este proceso es generalmente irreversible y juega un papel crucial en la catálisis heterogénea. Las variables que influyen en la adsorción incluyen la temperatura, la presión, la naturaleza del adsorbente (porosidad, área superficial, funcionalidad química) y la composición de la fase móvil, ya que otros compuestos pueden competir por los sitios de adsorción. Los datos experimentales se representan mediante isothermas de adsorción, como las de Langmuir y Freundlich, que describen la adsorción monomolecular y multicapa, respectivamente [42].

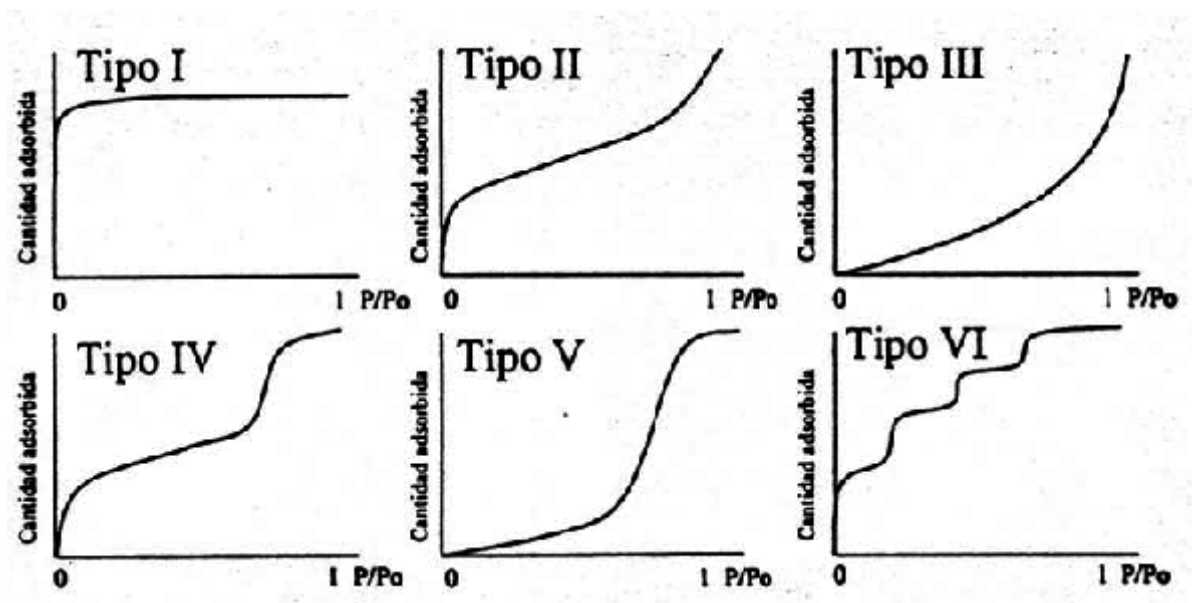


Figura 4.10: Representación gráfica en diagrama  $q - p$  de distintos tipos de isothermas de adsorción para sistemas gas-sólido [43].

La Figura 4.10 muestra diversos tipos de isothermas de adsorción bajo distintas condiciones de presión relativa [44]. (I) Lecho monomolecular, favorable para la adsorción. (II) Lecho multicapa, con un punto de inflexión. (III) Lecho multicapa, favorable para la desorción. (IV) Lecho multicapa con condensación en el poro, presenta dos puntos de inflexión. (V) Similar al (IV), pero con

condensación más pronunciada. (VI) Lecho multicapa en una superficie no porosa uniforme.

#### 4.4.2 Isotermas de adsorción

En el campo de la adsorción, varios modelos de isotermas se han desarrollado para describir cómo los gases o vapores se adsorben en superficies sólidas. Estos modelos resultan fundamentales para predecir el comportamiento de los adsorbentes bajo diferentes condiciones operativas, teniendo cada uno sus propias ventajas y limitaciones en función de las características específicas del sistema de adsorción. La isoterma de Langmuir es un modelo que asume sitios de adsorción equivalentes y monocapa sin interacciones entre moléculas. La teoría BET extiende este concepto para adsorción en múltiples capas, útil para superficies porosas y cálculo de superficie específica. El modelo Freundlich es empírico y describe adsorción en superficies heterogéneas con sitios de diferente energía. Otros modelos, como Toth y Dubinin-Radushkevich, abordan sistemas más complejos y no ideales, ajustándose a datos experimentales y factores como la ley de Henry y límites de saturación [45]. La Tabla 4.6 presenta un resumen de los principales modelos de isotermas de adsorción, sus tipos, así como sus ventajas y desventajas en el contexto de la adsorción en monolitos [45].

A continuación, se describen en detalle los modelos matemáticos de las isotermas de Langmuir, Freundlich, y BET al ser isotermas ampliamente utilizadas para describir la adsorción de  $\text{CO}_2$  en materiales porosos.

- **Isoterma de Langmuir:** Describe la adsorción en superficies homogéneas bajo el supuesto de monocapa, siendo adecuada para adsorbentes como el carbón activado. Su expresión es:

$$q = \frac{q_{\max} \cdot b \cdot C}{1 + b \cdot C} \quad (4.1)$$

donde  $q$  es la cantidad adsorbida,  $q_{\max}$  es la capacidad máxima de adsorción,  $b$  es la constante de afinidad de Langmuir, y  $C$  es la concentración de  $\text{CO}_2$ .

- **Isoterma de Freundlich:** Modelo empírico que describe la adsorción en superficies heterogéneas. Es útil para sistemas donde los sitios de adsorción tienen diferentes energías. Su ecuación es:

$$q = K_F \cdot C^{\frac{1}{n}} \quad (4.2)$$

donde  $K_F$  es la constante de Freundlich y  $n$  describe la intensidad de la adsorción.

Tabla 4.6: Resumen de modelos de isotermas de adsorción y métodos de transferencia de masa para monolitos adsorbentes [45].

Modelo	Tipo	Ventajas	Desventajas
<b>Langmuir</b>	Teórico	Consistente con la termodinámica a bajas cargas. Fácil de implementar en simulaciones computacionales.	Suposiciones limitadas. Base poco robusta.
<b>Freundlich</b>	Empírico	Muy útil para ajustar datos experimentales. Simple de aplicar.	Sin límite de ley de Henry a bajas concentraciones. No hay saturación alta.
<b>Brunauer - Emmett-Teller (BET)</b>	Semi-empírico	Considera la adsorción en multicapas, útil en sistemas complejos. Fácil de aplicar.	Aplicable solo en un rango de presión relativa de 0.05 a 0.3. Sin límite de saturación.
<b>Modified BET</b>	Semi-empírico	Similar a BET pero extendido para cubrir todo el rango de presiones relativas. Aplicable en todo el espectro.	Mantiene limitaciones de BET. Sin límite de saturación.
<b>Toth</b>	Empírico	Integra ley de Henry y saturación. Preciso en simulaciones.	Puede volverse inexacto a presiones moderadas, especialmente cuando se requiere precisión en aplicaciones específicas.
<b>Dubinin - Radushkevich (DR)</b>	Semi-empírico	Firme base termodinámica. Preciso a medias y altas concentraciones.	Termodinámicamente poco fiable a bajas cargas, limitando su uso en aplicaciones de bajas concentraciones.
<b>Dubinin - Astakhov (DA)</b>	Semi-empírico	Más flexible que DR. Preciso a medias y altas concentraciones.	Poco fiable a bajas cargas.
<b>Modified Dubinin - Radushkevich (MDR)</b>	Semi-empírico	Consistencia termodinámica a bajas cargas, manteniendo la precisión a lo largo de todo el espectro de concentración. Preciso en todo el rango.	Parámetros sin significado físico.

- **Modelo BET (Brunauer, Emmett y Teller):** Extiende el modelo de Langmuir para describir la adsorción en multicapas en superficies homogéneas. Su expresión es:

$$q = \frac{q_{\max} \cdot C}{(1 - C) \cdot (1 + (C - 1) \cdot C)} \quad (4.3)$$

Cada una de estas isotermas tiene aplicaciones específicas dependiendo de las características del material adsorbente y las condiciones operacionales.

### 4.4.3 Modelado y simulación de adsorción de CO<sub>2</sub>

Los modelos computacionales son fundamentales para simular la eficiencia de adsorción de contactores, ya que permiten evaluar y comparar rápidamente el rendimiento de distintos adsorbentes en diversas condiciones operativas. Esto facilita la transición de la escala de laboratorio a la escala industrial manteniendo la eficiencia de adsorción y optimizando los diseños para mejorar el rendimiento. La simulación de la ruptura de adsorción es clave para optimizar el proceso, ya que permite escalar, seleccionar y mejorar el adsorbente y, a su vez, reducir el trabajo experimental en condiciones de operación que pueden ser difíciles de alcanzar debido a la falta de materiales o recursos [45]. La modelización de la adsorción de contaminantes atmosféricos en adsorbentes suele implicar varios pasos, como se observa en la Figura 4.11. Primero, se simplifica la geometría del monolito; en diversos programas se pueden emplear modelos 1D, 2D o incluso 3D, dependiendo de la demanda computacional. En segundo lugar, es necesario aplicar las ecuaciones de transferencia de momento para simular el movimiento del gas dentro de la estructura monolítica, teniendo en cuenta la dinámica del flujo y la distribución de la velocidad en la fase gaseosa. De esta forma se logra capturar la transferencia del adsorbato entre la fase gaseosa y el adsorbente sólido, considerando tanto la transferencia en fase gaseosa como la transferencia de masa hacia las paredes del monolito [45].

### 4.4.4 Métodos numéricos

El método de elementos finitos (FEM) resuelve ecuaciones diferenciales parciales creando una malla de nodos discretizados, en los que las derivadas se aproximan mediante diferencias finitas, logrando una función que se aproxima a la solución analítica. Por su parte, el método de volúmenes finitos (FVM) utiliza una malla donde cada punto representa un volumen de control único, sobre el cual se integran las ecuaciones diferenciales, conservando de manera exacta propiedades como masa y energía. Esta característica hace al FVM especialmente adecuado para problemas complejos en dinámica de fluidos [46]. La malla es una representación discretizada del dominio computacional, dividida en celdas o elementos más pequeños donde se realizan los cálculos. La calidad del mallado en CFD es crucial para obtener soluciones numéricas precisas y estables [47].

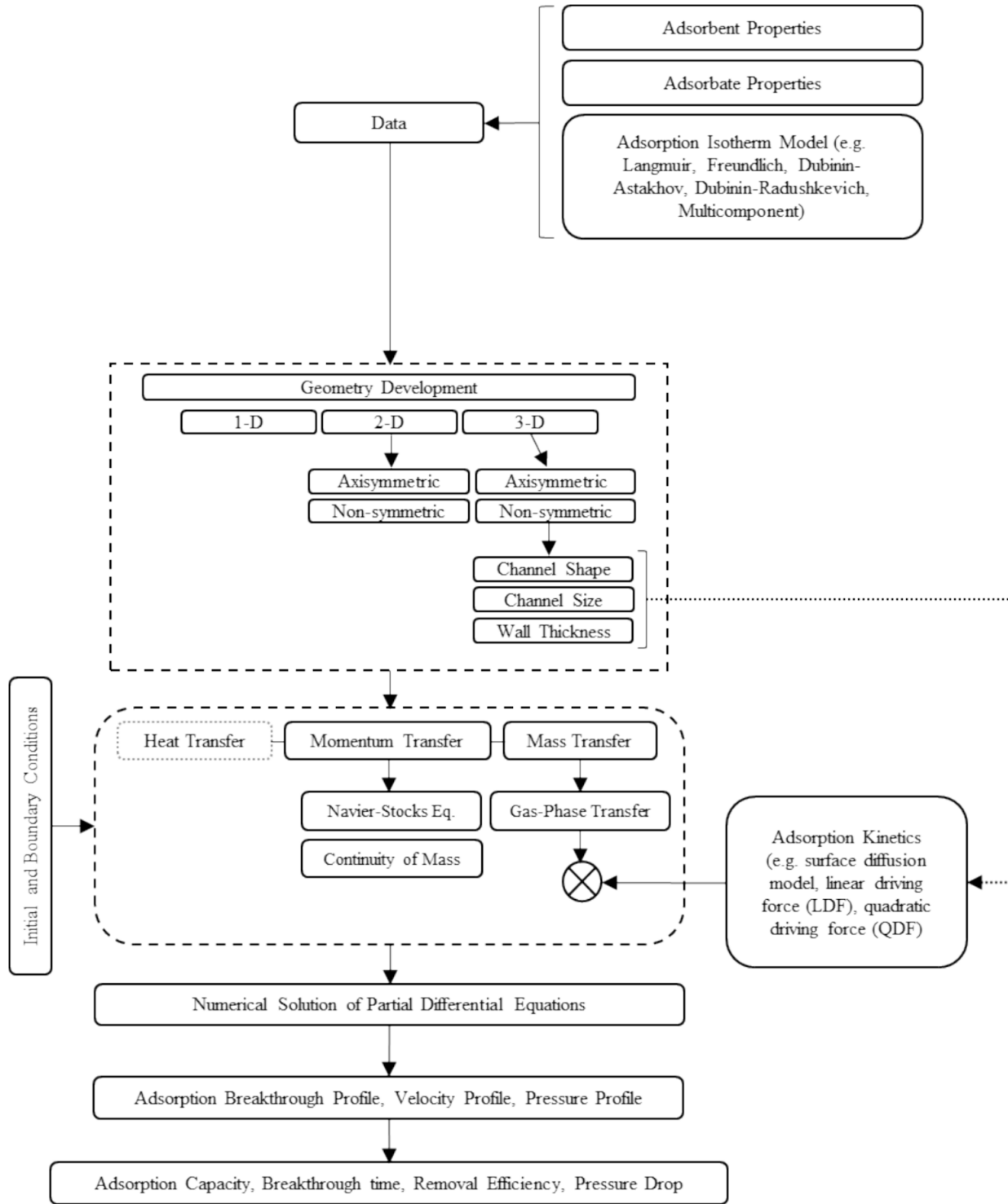


Figura 4.11: Diagrama de flujo de los distintos modelos de adsorción [45].

Ansys Fluent y COMSOL Multiphysics son herramientas clave para la simulación CFD, permitiendo modelar el flujo de fluidos, transferencia de masa y calor, y reacciones químicas.

COMSOL utiliza el método de elementos finitos (FEM), mientras que ANSYS Fluent emplea el método de volúmenes finitos (FVM) [48, 49]. MATLAB, por su parte, es esencial para modelos 1D, análisis paramétricos y la visualización de datos de simulaciones, complementando las optimizaciones de modelos y el análisis de balance de masa y energía [50].

# Capítulo 5

## Modelo de Proceso Industrial de Captura

### 5.1 Diagrama del Proceso

Los procesos de captura directa del aire constan de diversos lechos monolíticos puestos en paralelo para maximizar la eficiencia del sistema. En cada lecho, el aire fluye a través de canales adsorbentes, donde el  $\text{CO}_2$  es capturado. Los lechos operan de manera cíclica, alternando entre las fases de adsorción y regeneración. Durante la adsorción, el aire es procesado para extraer  $\text{CO}_2$ , mientras que en la regeneración, el  $\text{CO}_2$  capturado se libera mediante un cambio en las condiciones operativas, como temperatura o presión dependiendo del tipo de adsorción (TSA, PSA, VPSA o TVSA). Este diseño modular asegura un flujo continuo y una alta capacidad de captura de  $\text{CO}_2$ . A continuación, en la Figura 5.1 se presenta un esquema general de un equipo de captura DAC utilizando lechos monolíticos puestos en paralelo [51].

En la descripción del dominio para un modelo de captura, se considera solo un lecho monolítico compuesto por canales de sección cuadrada, representados mediante un enfoque unidimensional (1D) en la dirección axial. Este enfoque simplificado asume que las variaciones en las direcciones radial y transversal son despreciables, dado que las propiedades del material se consideran homogéneas e isotrópicas en estas direcciones. El dominio tiene una longitud total de 500 cm ( $L$ ) y un diámetro de 2.9 cm ( $D$ ), dividido en cinco secciones discretas 100 cm ( $L_i$ ). Para evaluar el perfil de concentración y la capacidad de adsorción a lo largo del lecho, el canal se discretiza axialmente en nodos. Esta aproximación unidimensional permite una reducción significativa en la complejidad computacional del modelo. El esquema del dominio se puede representar en la Figura 5.2.

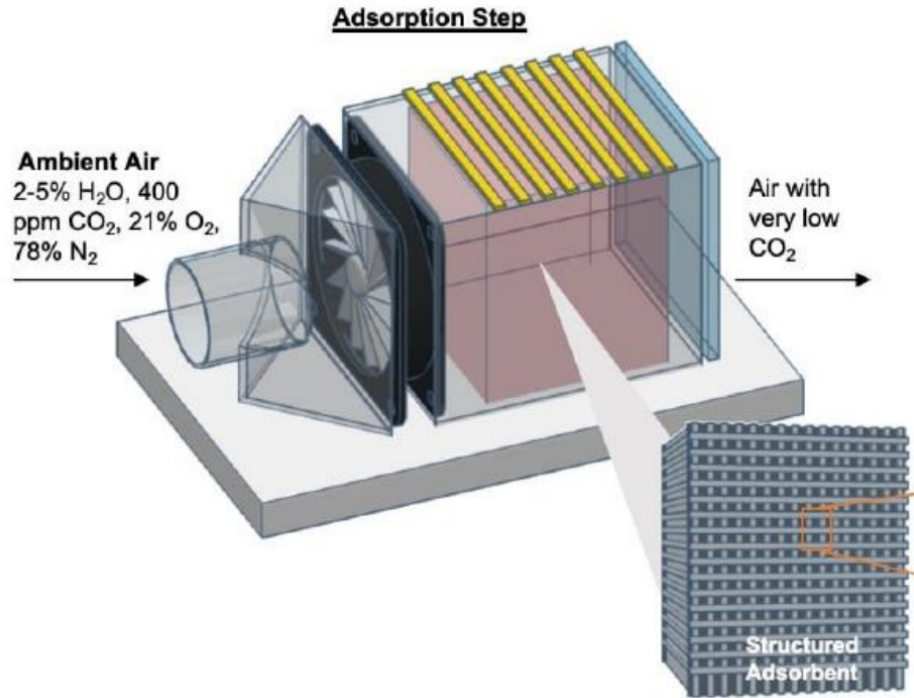


Figura 5.1: Esquema general de un sistema DAC con lechos dispuestos en paralelo [51].

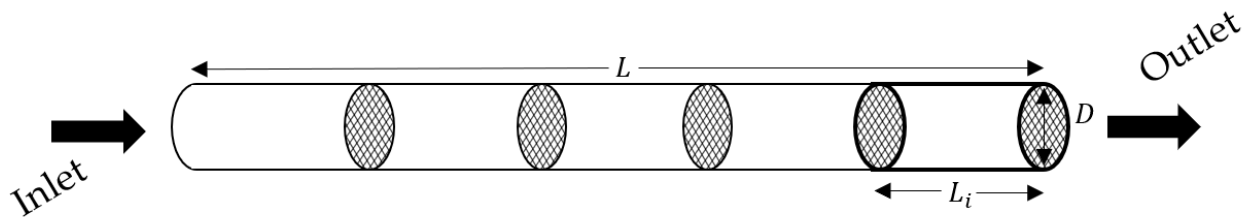


Figura 5.2: Representación del lecho monolítico para la modelación.

## 5.2 Modelo Matemático

Para el desarrollo del modelo matemático unidimensional de adsorción, se adoptaron las siguientes suposiciones: (i) se considera una condición isotérmica, (ii) se asume un flujo tipo plug disperso, y (iii) se establece que el efecto de la adsorción de nitrógeno es despreciable [52]. El balance de masa global y por componente siendo adsorbido por el contactor se presentan en la ecuación (5.1) y (5.2) respectivamente. Estas expresiones determinan la conservación de masa que incluye términos para el transporte convectivo, la acumulación temporal y la difusión dentro de un medio poroso [53].

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( D_g \frac{\partial}{\partial z} \right) - v_{ch} \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon} \left( \frac{\partial q}{\partial t} \right) \quad (5.1)$$

$$\varepsilon \frac{\partial v_{ch}}{\partial z} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = 0 \quad (5.2)$$

El modelo Linear Driving Force (LDF) describe la velocidad de adsorción de gases en adsorbentes, basado en la diferencia de concentraciones entre la fase fluida y el lecho adsorbente. Este enfoque, ampliamente utilizado para análisis transitorios en columnas de adsorción, destaca por su simplicidad y consistencia física [52].

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} = \frac{3D_s}{w_c^2} (q^* - \bar{q}) \quad (5.3)$$

Es necesario ajustar la medida del diámetro efectivo del canal en función de la geometría específica del monolito, considerando factores como la distribución del flujo y la resistencia al transporte en los poros del material adsorbente. En el caso de canales cuadrados, el grosor de pared corregido para un canal cuadrado considera las contribuciones de las cuatro esquinas, como se muestra a continuación.

$$w_c = w \left( 1 + \frac{w}{h} \right) \quad (5.4)$$

Para el modelo de adsorción, se utilizó la isoterma de Langmuir. Esta expresión permite representar la capacidad de adsorción en diferentes sitios dentro del sustrato, teniendo en cuenta la variabilidad en la energía de adsorción y la heterogeneidad de los sitios en el material. La ecuación general de la isoterma de Langmuir se expresa a partir de la Ecuación (5.5) [54].

$$q = \frac{q_{\max} \cdot b \cdot C}{1 + b \cdot C} \quad (5.5)$$

La simulación se realiza en un canal representativo del monolito debido a la simetría geométrica presente en todos los canales. Permitiendo reducir la complejidad computacional del modelo sin perder precisión en los resultados [52]. La estructura del monolito se describe utilizando

distribuciones gaussianas para el tamaño de los canales y el grosor de las paredes, caracterizadas por un valor promedio y una desviación estándar, la que se muestra a continuación [52].

$$D_{ch} = 0.9 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_l} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_l^2}(h - h_{avel})^2\right) + 0.1 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_s} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_s^2}(h - h_{aves})^2\right) \quad (5.6)$$

$$D_w = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_w} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_w^2}(w - w_{ave})^2\right) \quad (5.7)$$

Para limitar el rango de las distribuciones de tamaño, se elige un límite superior e inferior para  $w$  y  $h$  y las funciones de distribución se normalizan en las funciones de probabilidad  $P_{ch}$  y  $P_w$ . A partir de la función de probabilidad combinada, la fracción de vacío de cada canal y el área de sección transversal de la columna, es posible derivar el número teórico de canales para el monolito [52].

$$N_C = A \int_{w_{min}}^{w_{max}} \int_{h_{min}}^{h_{max}} P_{ch} P_w h^2 dh dw \quad (5.8)$$

La Ecuación (5.9) modela el caudal de gas total a través de un conjunto de canales en un monolito, considerando la velocidad del canal, el número de canales y las dimensiones de los canales [52].

$$Q = N_C \int_{h_{min}}^{h_{max}} P_{ch} \cdot v_{ch} \cdot h^2, dh \quad (5.9)$$

Las concentración promedio  $c_{ave}$  representa la concentración promedio de  $\text{CO}_2$  en la fase gaseosa a lo largo de todos los canales del monolito, considerando las variaciones de velocidad del gas y geometría de los canales, como se muestra en la Ecuación (5.10). Por otro lado,  $q_{ave}$  es la cantidad promedio de  $\text{CO}_2$  adsorbida en la fase sólida del monolito, integrada sobre los distintos tamaños de canal y espesores de pared, como se muestra en la Ecuación (5.11) [52].

$$c_{ave} = \frac{\int_{h_{min}}^{h_{max}} \int_{w_{min}}^{w_{max}} c \cdot v_{ch} \cdot h^2 \cdot P_{ch} \cdot P_w, dw, dh}{\int_{h_{min}}^{h_{max}} \int_{w_{min}}^{w_{max}} v_{ch} \cdot h^2 \cdot P_{ch} \cdot P_w, dw, dh} \quad (5.10)$$

$$\bar{q}_{ave} = \int_{h_{min}}^{h_{max}} \int_{w_{min}}^{w_{max}} \bar{q} \cdot P_{ch} \cdot P_w dw dh \quad (5.11)$$

Los parámetros utilizados en la simulación del modelo unidimensional se seleccionaron a partir de datos experimentales [52]. Estos parámetros incluyen propiedades físicas y geométricas del monolito, así como condiciones de operación para representar el fenómeno de adsorción de CO<sub>2</sub> en el lecho. La Tabla 5.1 presenta un resumen de estos valores, que constituyen la base para la validación y análisis del modelo propuesto.

Tabla 5.1: Parámetros y valores experimentales para la columna monolítica [52].

<b>Lecho Monolítico</b>		
<b>Parámetro</b>	<b>Valor</b>	<b>Dimensión</b>
Longitud de la columna monolítica total, $L$	0,5	m
Longitud de cada sección de la columna	0,1	m
Área de sección transversal	660	mm <sup>2</sup>
Fracción de vacío promedio, $\varepsilon$	0,6827	-
Difusividad en fase gaseosa, $D_g$	$1,7 \times 10^{-5}$	m <sup>2</sup> /s
Difusividad en fase sólida, $D_s$	$3,3 \times 10^{-9}$	m <sup>2</sup> /s
Altura de los canales centrales, $h_{ave,l}$ , y desviación estándar, $\sigma_l$	$1,38 \pm 0,007$	mm
Altura de los canales laterales, $h_{ave,s}$ , y desviación estándar, $\sigma_s$	$1,0 \pm 0,008$	mm
Espesor medio de la pared, $w_{ave}$ , y desviación estándar, $\sigma_w$	$0,14 \pm 0,0015$	mm
Caudal volumétrico de N <sub>2</sub>	8333	mm <sup>3</sup> /s
Parámetro de la isoterma de Langmuir, $q_s$	11,532	mmol/cm <sup>3</sup>
Parámetro de la isoterma de Langmuir, $b$	38,503	cm <sup>3</sup> /mmol

### 5.3 Resolución Numérica

Para validar la dinámica del modelo propuesto, se implementó un modelo unidimensional en el software de programación MATLAB. Este modelo considera un flujo de gas en dirección axial, despreciando las variaciones radiales y transversales. El dominio axial del monolito se discretizó utilizando un esquema de diferencias finitas centradas para las derivadas espaciales. Para ello, se dividió la longitud del lecho ( $L = 0.1$  m) en  $N = 100$  nodos, obteniendo un paso espacial.

$$\Delta z = \frac{L}{N - 1} \quad (5.12)$$

Las derivadas espaciales se aproximan mediante el siguiente esquema de diferencias finitas:

- Primera derivada (convección):

$$\frac{\partial C}{\partial z} \approx \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta z} \quad (5.13)$$

- Segunda derivada (dispersión axial):

$$\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \approx \frac{C_{i+1} - 2C_i + C_{i-1}}{\Delta z^2} \quad (5.14)$$

Las condiciones de contorno implementadas son: -  $C = C_{\text{in}}$  en la entrada ( $z = 0$ ) -  $\frac{\partial C}{\partial z} = 0$  en la salida ( $z = L$ )

Para la solución temporal, se empleó el método de integración ‘ode23’, un método de Runge-Kutta de segundo y tercer orden, ideal para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs) con dinámica suave. Este método ajusta automáticamente el tamaño del paso de tiempo para equilibrar precisión y eficiencia.

## 5.4 Validación

La validación se realizó mediante la comparación de los resultados de la simulación con los datos experimentales reportados, midiendo la capacidad de adsorción y las curvas de ruptura de  $\text{CO}_2$  en monolitos de carbón bajo condiciones controladas. Inicialmente, se evaluó la cantidad de moles de  $\text{CO}_2$  adsorbidos por metro cúbico de carbón en un rango de concentraciones de  $\text{CO}_2$  del 2% al 40%, utilizando información experimental de rupturas de adsorción y desorción reportado por Ahn & Brandani [52]. Donde se midió la capacidad de adsorción y las curvas de ruptura de  $\text{CO}_2$  en monolitos de carbón en base a madera bajo condiciones controladas de temperatura. La validación de la curva se presenta en la Figura 5.3.

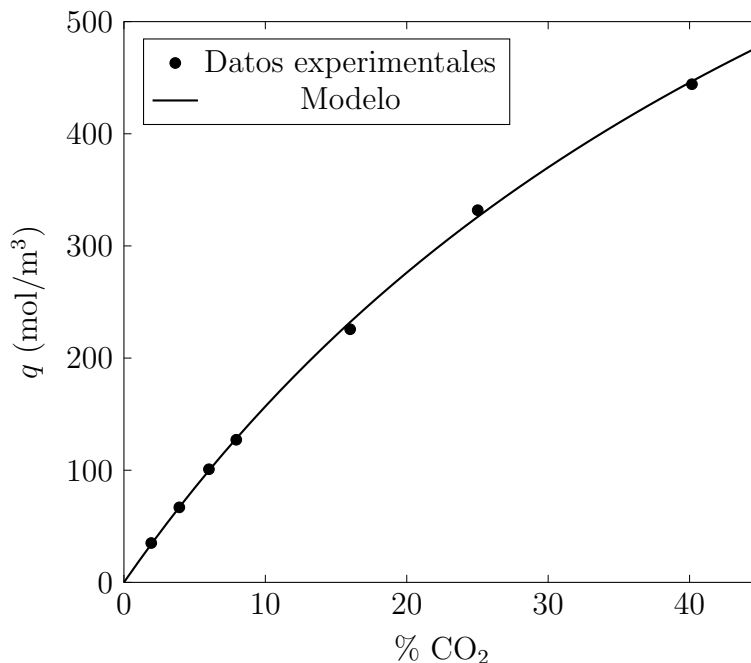


Figura 5.3: Equilibrio de adsorción de dióxido de carbono en el monolito de panel de carbón a 298K y presión atmosférica [52].

En relación con la curva de ruptura de adsorción de  $\text{CO}_2$ , los resultados obtenidos a partir de las condiciones de la Tabla 5.1 se muestran en la Figura 5.5. Los resultados de este modelo fueron insatisfactorios, ya que el punto de quiebre se desvió aproximadamente 250 segundos. Debido a la complejidad del modelo predictivo implementado en MATLAB, es difícil identificar con precisión las causas de esta inexactitud. Sin embargo, las principales fuentes de error pueden estar relacionadas con los parámetros del lecho y las condiciones operativas, como el caudal de entrada o la velocidad. Dado que la velocidad del canal se determinó de manera iterativa en función del caudal, es posible que la tasa general de ingreso de los componentes al lecho sea significativamente diferente. No obstante, aún existe incertidumbre sobre las causas de la inexactitud del modelo. Para ilustrar el procedimiento de ajuste de la velocidad del canal y la comparación con los datos experimentales, se presenta el diagrama de flujo (Figura 5.4). Este diagrama resume el proceso iterativo implementado para ajustar la velocidad del canal y mejorar la precisión del modelo.

Con el objetivo de corregir la discrepancia observada en el tiempo de quiebre, se procedió a reducir la velocidad del flujo a través del canal en un factor de 10. Esta modificación en la velocidad se realizó con el fin de ajustar el perfil de adsorción y mejorar la precisión de los resultados del modelo. La comparación entre los resultados obtenidos después de esta corrección se muestra gráficamente en la Figura 5.6.

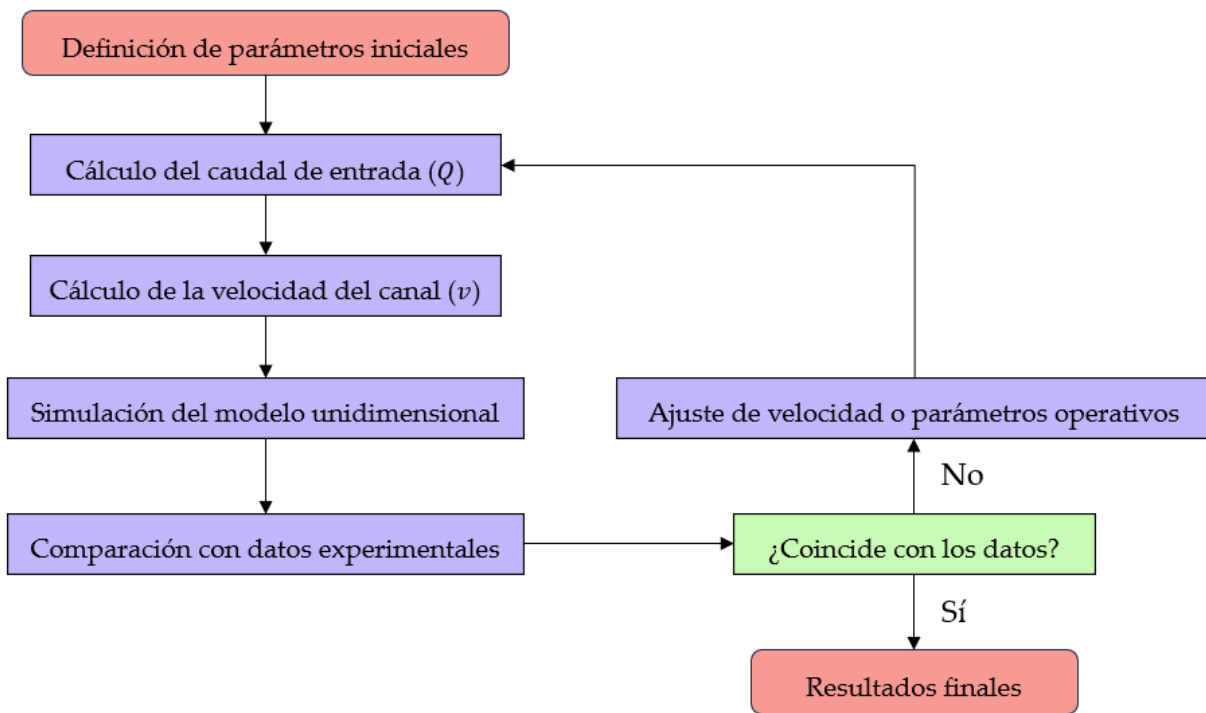


Figura 5.4: Diagrama de flujo del proceso iterativo para la determinación de la velocidad del canal.

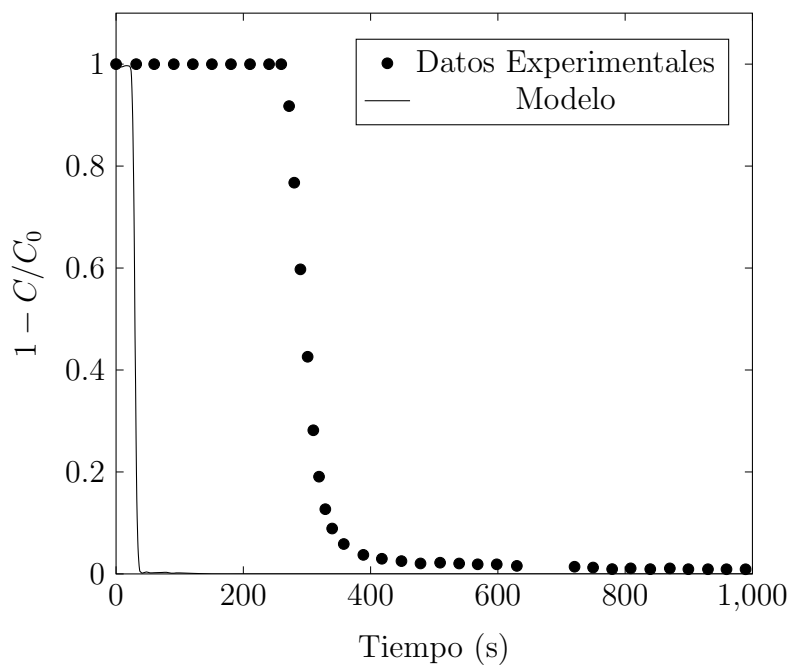


Figura 5.5: Modelo de curva de ruptura de adsorción de CO<sub>2</sub> en monolito de carbón.

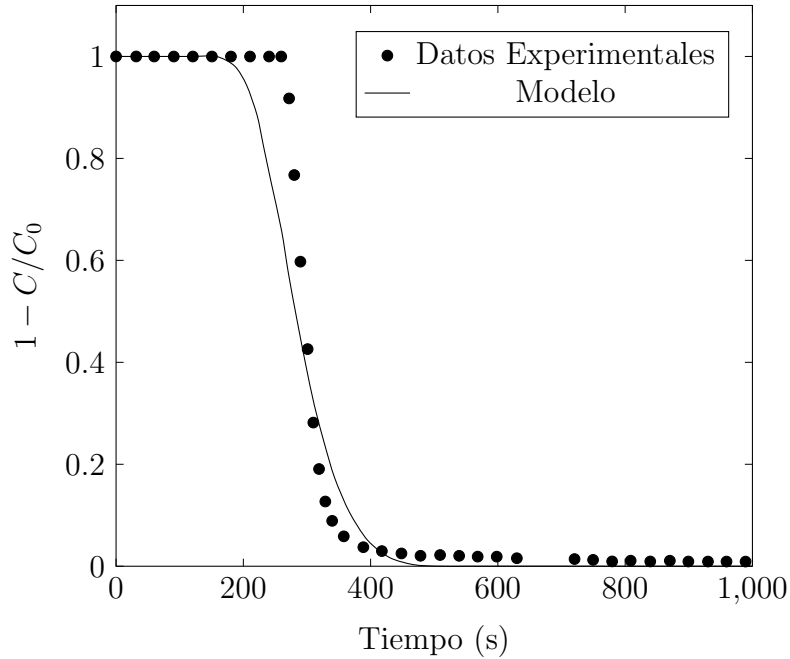


Figura 5.6: Modelo de curva de ruptura de adsorción de  $\text{CO}_2$  en monolito de carbón con ajuste de velocidad por factor de 10.

Al comparar los resultados obtenidos con la velocidad de canal corregida en el modelo, representados en la Figura 5.6, con los datos experimentales, se observa una similitud general en las tendencias. Sin embargo, se identifica un adelanto en el tiempo de adsorción, lo que indica una ligera discrepancia entre las predicciones del modelo y los datos experimentales. Este desajuste podría atribuirse a diferencias en la difusividad del gas dentro del modelo, ya que las variaciones en este parámetro pueden influir en la forma de la curva de adsorción, afectando especialmente la rapidez con que el gas alcanza el equilibrio en el contactor. A pesar de este pequeño desajuste, el comportamiento global del modelo es bastante cercano al observado experimentalmente, lo que sugiere que otras variables del sistema, como la geometría del canal, la interacción entre el gas y el material adsorbente, y posibles imperfecciones en las condiciones operativas, pueden estar contribuyendo al desfase.

De esta forma se logra desarrollar un modelo que, aunque con pequeñas desviaciones, es capaz de predecir el tiempo de ruptura en un contactor monolítico de canales cuadrados fabricado a partir de carbón, lo que valida su capacidad para replicar el comportamiento del proceso de adsorción en condiciones controladas.

# Capítulo 6

## Análisis Económico

El diseño de sistemas de captura directa de aire presenta ciertos desafíos en términos de escalabilidad, costos de capital (CAPEX), costos operativos (OPEX) y costo nivelado de captura (LCOC). En esta sección se aborda el análisis del consumo energético, así como los costos en dolares americanos (USD) asociados a la adsorción mediante carbón activado en contraste a otras tecnologías de captura, para producciones que van desde 10 hasta 1 millón de toneladas de CO<sub>2</sub> al año.

### 6.1 Escalamiento Industrial

Para escalar el proceso de captura directa de carbono (DAC) a nivel industrial, se redimensionó el modelo de un contactor monolítico validado previamente, configurando un lecho con un área transversal de 10 000 mm<sup>2</sup> (0.01 m<sup>2</sup>) y una longitud de 1 m (dividida en 4 secciones de 20 cm cada una), optimizado para manejar grandes volúmenes de aire en condiciones representativas de operación industrial. El sistema opera en ciclos de adsorción-desorción, donde la curva de ruptura que grafica la concentración de CO<sub>2</sub> a la salida del lecho en función del tiempo es clave para determinar el punto en que el adsorbente se satura y deja de capturar eficientemente el gas. Inicialmente, la concentración de salida es cercana a cero, pero al alcanzar el punto de ruptura (generalmente definido cuando la concentración de salida supera un umbral del 1% to 5% de la entrada), el lecho debe regenerarse para evitar pérdidas de eficiencia. En este caso, se emplea el proceso TVSA (*Temperature Vacuum Swing Adsorption*), una de las tecnologías más utilizadas en DAC a nivel global debido a su balance óptimo entre eficiencia energética y capacidad de

regeneración. El TVSA combina vacío (para reducir la presión parcial del  $\text{CO}_2$  y facilitar su desorción) y calentamiento moderado (para debilitar la afinidad del adsorbente por el  $\text{CO}_2$ ), lo que permite una regeneración rápida y repetible del material, tal como se ilustra en el diagrama de flujo adjunto (Figura 6.1). Este método fue seleccionado por su escalabilidad, su capacidad para operar con flujos diluidos de  $\text{CO}_2$  (como el aire ambiente) y su menor consumo energético comparado con alternativas como el TSA (sin vacío) o el PSA (sin calentamiento). La operación del sistema se mantiene en condiciones estables, con un flujo de aire de  $0.1217 \text{ cm s}^{-1}$  (para asegurar un tiempo de contacto adecuado y evitar turbulencias) y ciclos de 20 min (1200 s), garantizando así una captura continua y una alta productividad en un esquema industrial.

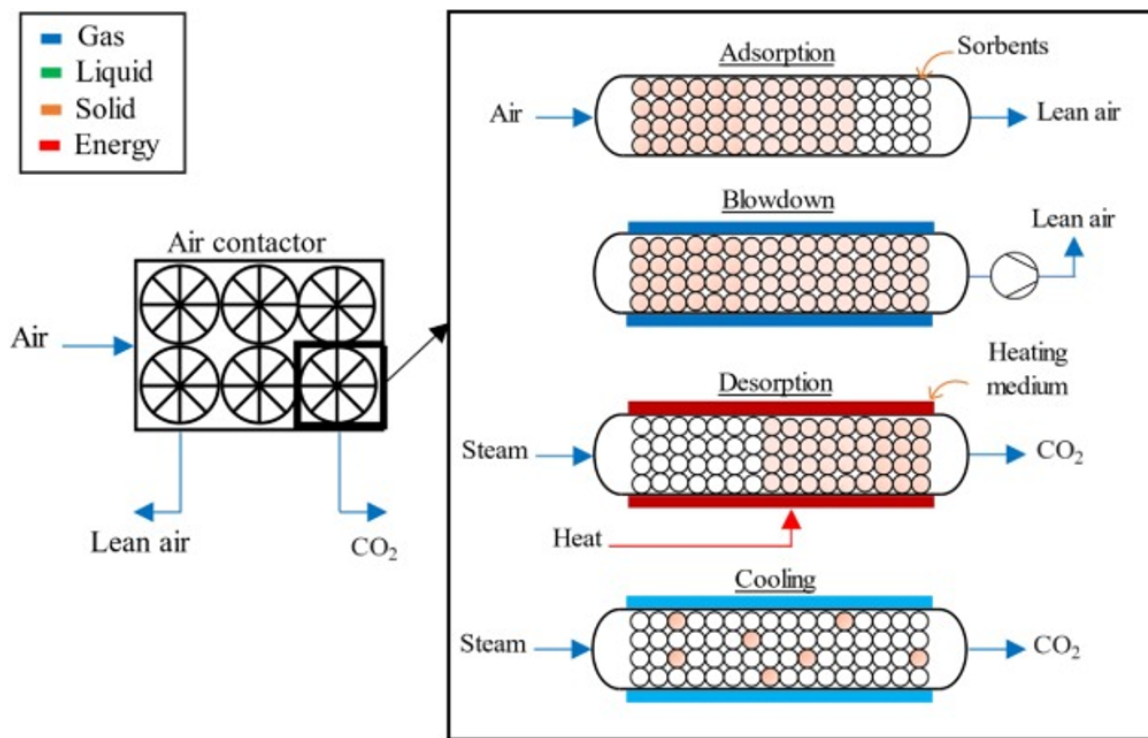


Figura 6.1: Diagrama del proceso TVSA mostrando las etapas de adsorción (flujo de aire a presión ambiente), desorción (aplicación de vacío y calor) y enfriamiento [55].

De acuerdo con la curva de la isoterma de adsorción de  $\text{CO}_2$  en monolitos de carbón activado, a una concentración típica de 400 ppm (0.04% molar en aire), el lecho presenta una capacidad máxima de adsorción de 0.00148 mol de  $\text{CO}_2$  por kilogramo de carbón activado, determinada bajo un comportamiento lineal (región de la Ley de Henry) donde la carga adsorbida ( $q = K_H \cdot C$ ). Esta relación lineal permitió extrapolar la capacidad del adsorbente a escala industrial, asumiendo invariabilidad en la cinética de adsorción y en la eficiencia del contacto gas-sólido, condiciones validadas experimentalmente para carbones activados en sistemas TVSA [56]. Considerando que la longitud del lecho (1 m), la velocidad superficial del flujo ( $0.1217 \text{ cm/s}$ ) y la relación área/volumen

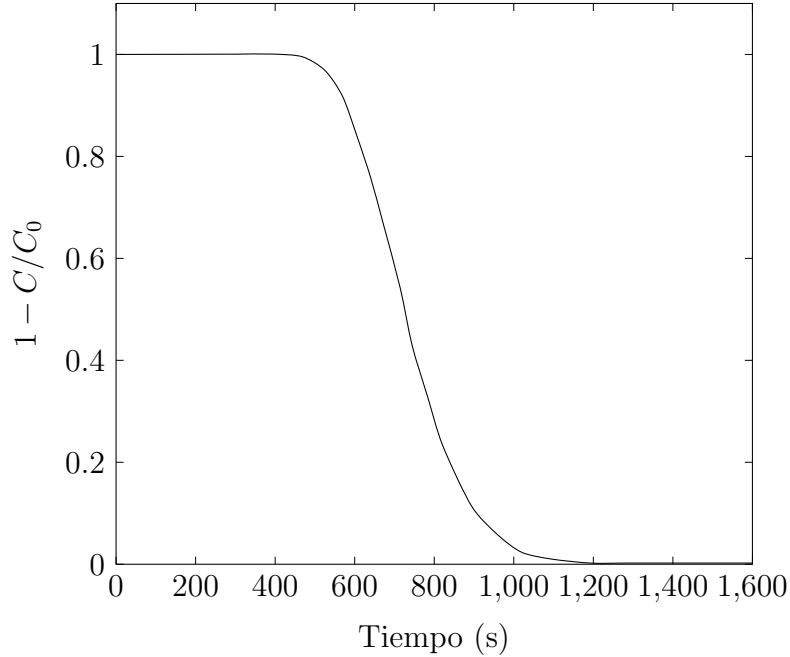


Figura 6.2: Curva de ruptura para un lecho monítico de carbón activado a escala industrial DAC.

se mantuvieron constantes —evitando efectos de dispersión axial o canalización—, se calculó el número máximo de ciclos anuales (24.840 ciclos/año), asumiendo una regeneración que restaura el 95% de la capacidad inicial en cada ciclo y descontando 20 días/año para mantenencias. La capacidad máxima anual de adsorción por lecho ascendió así a 3.434 moles de  $\text{CO}_2$ /año, valor que, bajo un modelo de escalado lineal (justificado para presiones parciales  $<1000$  ppm y ausencia de efectos adversos por humedad o contaminantes [57]), permitió dimensionar la cantidad de lechos y la masa total de carbón activado requerida para distintas escalas de producción (Tabla B.1, Anexo B). Se incluyó un 20% de sobredimensionamiento para compensar posibles pérdidas de capacidad por degradación cíclica, asegurando así la robustez del diseño industrial.

## 6.2 CAPEX

El *CAPEX* representa los costos iniciales necesarios para la instalación de la infraestructura de captura de  $\text{CO}_2$ . Tal como se muestra en la Figura 6.3, estos costos varían significativamente en función de la tecnología empleada y la escala de producción. Para el análisis, se utilizaron datos de referencia de la producción de una planta de captura de carbono DAC en los Estados Unidos para una capacidad de producción de 1  $\text{MtCO}_2$ /año [58]. En donde se compara los costos de inversión y operación de diferentes tecnologías de captura. Estas incluyen la absorción química

mediante solventes acuosos en escenarios optimista (bajo costo) y realista (alto costo), así como el uso de adsorbentes convencionales. Los costos asociados al uso de adsorbentes convencionales (\$9,81 USD/kg) resultan notablemente superiores a los del carbón activado (\$7,37 USD/kg). Esta diferencia refleja la mayor eficiencia del carbón activado en cuanto a su elaboración, lo que la hace mayormente económica debido a su capacidad de creación a partir de diversas fuentes biológicas, tanto en términos de equipos necesarios como de los procesos auxiliares involucrados.

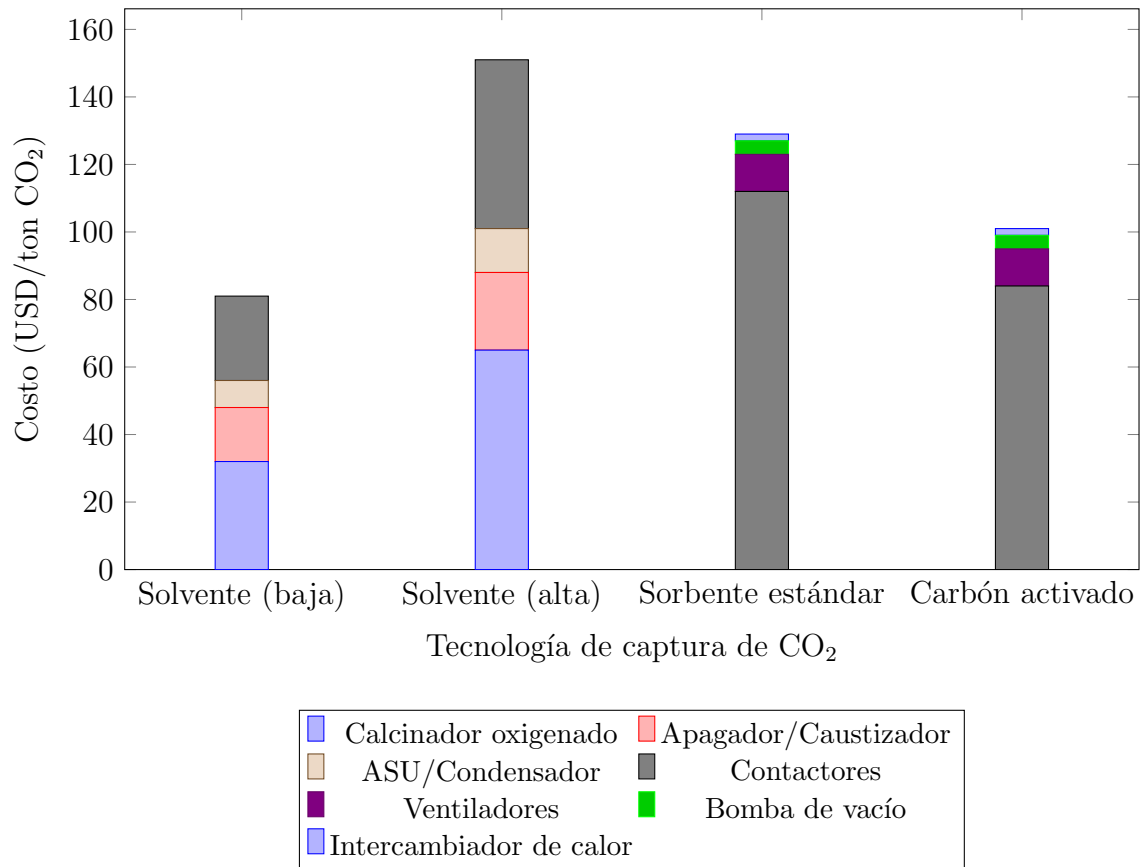


Figura 6.3: CAPEX para diferentes métodos de separación DAC en una planta de 1 MtCO<sub>2</sub> al año [58].

En la Figura 6.4, se muestra cómo el CAPEX por tonelada de CO<sub>2</sub> capturado utilizando lechos de carbón activado disminuye a medida que aumenta la escala de producción, lo que refleja la economía de escala común en estos procesos. Este comportamiento se explica por la optimización de los equipos y los procesos asociados, como el ventilado de aire, que se vuelven más eficientes a medida que se incrementa la producción anual de CO<sub>2</sub>. De hecho, para producciones pequeñas, como 10 tCO<sub>2</sub>/año, los costos de instalación son mucho más altos debido a la subutilización de equipos y la falta de optimización de los procesos.

El CAPEX no solo considera el costo de los equipos, sino también los gastos asociados a

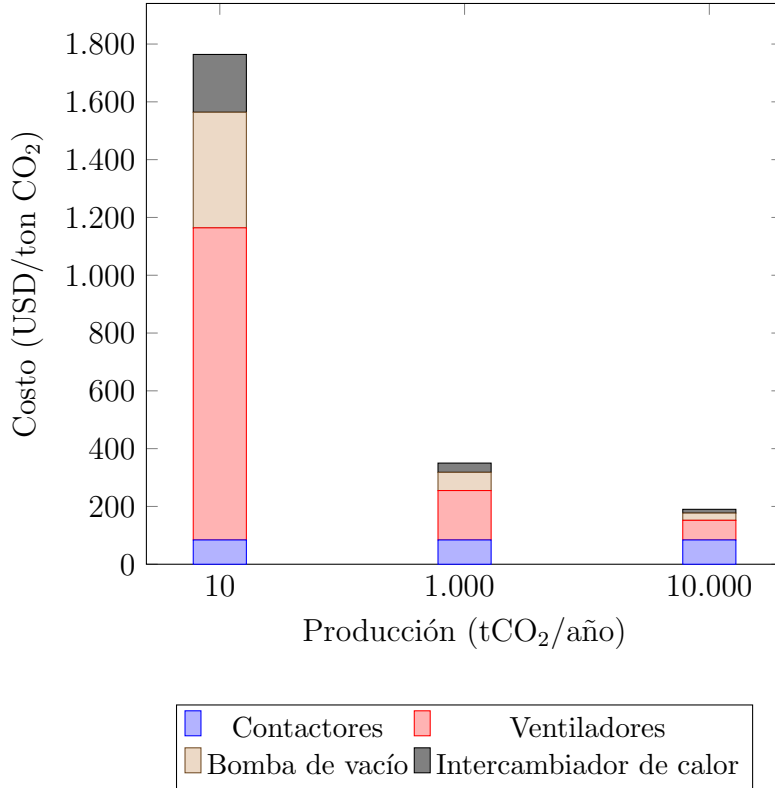


Figura 6.4: CAPEX para una planta de captura de CO<sub>2</sub> con carbón activado, para diferentes niveles de producción.

su instalación, incluyendo instrumentación, tuberías, sistemas eléctricos, edificios, mejoras en el sitio y servicios auxiliares. Estos elementos representan una parte significativa del costo total, especialmente en escalas menores, donde la economía de escala aún no se refleja completamente. A continuación, en la Tabla 6.1, se desglosan los costos de inversión directa e indirecta para cada una de las distintas capacidades de producción de CO<sub>2</sub>. Estos costos incluyen tanto los gastos relacionados con la instalación de los equipos principales como los costos adicionales derivados de servicios auxiliares, instrumentación, supervisión, y contingencias. La siguiente tabla presenta los costos totales para tres capacidades de captura anual de CO<sub>2</sub>: 10 toneladas, 1,000 toneladas y 10,000 toneladas. Los costos se muestran en \$ USD.

### 6.3 OPEX

El OPEX engloba los costos operativos, tales como consumo energético, mantenimiento, mano de obra y otros insumos. De acuerdo con los resultados mostrados en la Figura 6.5 para una

Tabla 6.1: Porcentaje del costo del equipo entregado para diferentes capacidades de captura de CO<sub>2</sub>.

Concepto	10 tCO <sub>2</sub> /año	1.000 tCO <sub>2</sub> /año	10.000 tCO <sub>2</sub> /año
<b>Costos directos</b>			
Instalación de equipos	6.880	136.646	741.439
Instrumentación y controles (instalados)	7.586	150.661	817.484
Piping (tuberías, instaladas)	5.469	108.616	589.349
Sistemas eléctricos (instalados)	1.764	35.037	190.113
Edificios y servicios	2.646	52.556	285.169
Mejoras en el sitio	2.117	42.045	228.135
Instalación de servicios auxiliares	2.117	42.045	228.135
Total costos directos, D	28.579	567.606	3.079.824
<b>Costos indirectos</b>			
Ingeniería y supervisión	5.645	112.120	608.360
Gastos de construcción	5.998	119.127	646.383
Gastos legales	706	14.015	76.045
Margen del contratista	3.352	66.571	361.214
Contingencia	6.527	129.638	703.416
Total costos indirectos, I	22.228	441.471	2.395.418
<b>Inversión total de capital, I + D</b>	<b>50.806</b>	<b>1.009.077</b>	<b>5.475.242</b>
<b>Capital de trabajo</b>	7.621	151.361	821.286
<b>Total de capital de inversión</b>	<b>58.427</b>	<b>1.160.438</b>	<b>6.296.528</b>

producción de 1MtCO<sub>2</sub> al año, el uso de carbón activado presenta un menor consumo energético (0,18 MWh/tCO<sub>2</sub>) en comparación con el adsorbente sólido convencional (0,23 MWh/tCO<sub>2</sub>), lo que reduce los costos de operación significativamente. Sin embargo, a medida que la escala de producción aumenta, la proporción de costos fijos asociados a mantenimiento y mano de obra también disminuye, contribuyendo a una reducción global en el OPEX.

La Figura 6.6 muestra los costos operativos para una planta de captura directa de aire basada en carbón activado, considerando los tres niveles de producción: 10, 1.000 y 10.000 toneladas de CO<sub>2</sub> por año. Como se observa, los costos disminuyen por tonelada capturada a medida que la escala de producción aumenta, reflejando economías de escala.

En los procesos de captura DAC, la electricidad se utiliza principalmente para alimentar equipos críticos como los ventiladores, las bombas de vacío y los sistemas de regeneración de adsorbente. Estos equipos requieren grandes cantidades de energía para mover el aire a través de los contactores y regenerar el adsorbente de manera continua. Esta alta demanda de electricidad, especialmente en plantas de menor capacidad, se traduce en un impacto significativo en el OPEX. A partir de un análisis de los costos operativos, se observa que la electricidad es el principal componente, representando entre el 30% y el 50% del OPEX total, especialmente en plantas de menor capacidad

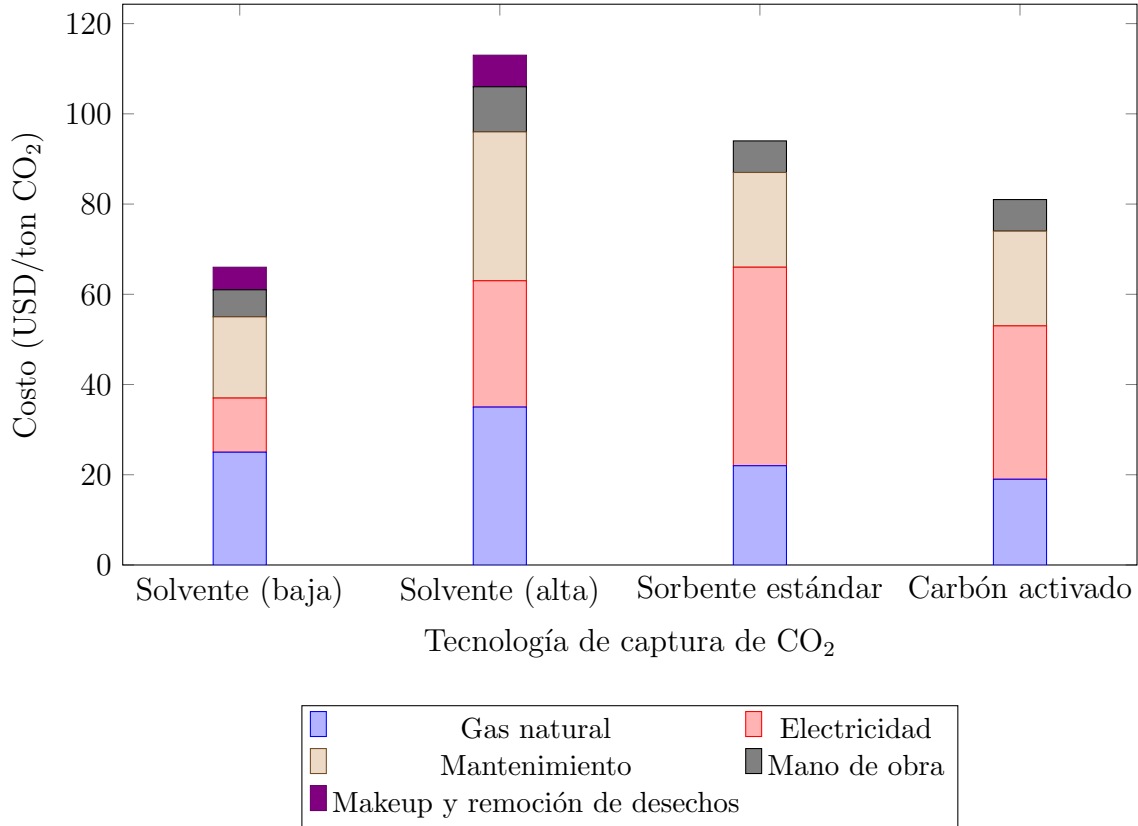


Figura 6.5: OPEX para diferentes métodos de separación DAC en una planta de 1 MtCO<sub>2</sub> al año.

(10 tCO<sub>2</sub>/año), donde el costo es de \$48/ton CO<sub>2</sub>. A medida que aumenta la producción, el costo de electricidad disminuye a \$38/ton CO<sub>2</sub> para 10.000 tCO<sub>2</sub>/año, reflejando economías de escala. El gas natural, que se utiliza principalmente para la regeneración térmica del adsorbente, también muestra una reducción de costos con la escala, bajando de \$27/ton CO<sub>2</sub> a \$20/ton CO<sub>2</sub> entre 10 y 10.000 tCO<sub>2</sub>/año. Este gas se usa como fuente de calor para desorber el CO<sub>2</sub> capturado del adsorbente, siendo esencial para el ciclo de adsorción-desorción. Los costos de mantenimiento y mano de obra son fijos en términos absolutos (\$21/ton CO<sub>2</sub> y \$7/ton CO<sub>2</sub>, respectivamente), pero su impacto relativo disminuye con la escala de producción.

## 6.4 Costo nivelado de captura

El costo nivelado de captura (LCOC) combina el CAPEX y OPEX para determinar un costo promedio por tonelada de CO<sub>2</sub> capturado. Este indicador permite comparar tecnologías y escalas de producción de manera uniforme. Este se define como el costo promedio por tonelada de CO<sub>2</sub>

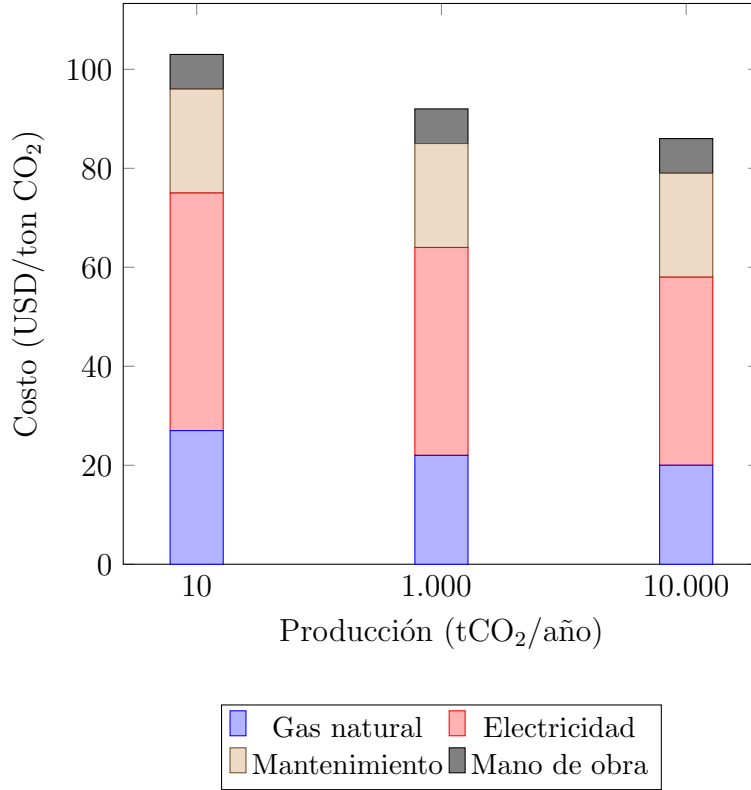


Figura 6.6: OPEX para una planta de captura de CO<sub>2</sub> con carbón activado, utilizando la red eléctrica como fuente de energía, para diferentes niveles de producción.

capturado durante la vida útil de la infraestructura y se estima utilizando la siguiente ecuación:

$$LCOC = \frac{CAPEX + OPEX \cdot n}{Producción \cdot n} \quad (6.1)$$

Los resultados del costo nivelado para una producción de 1 MtCO<sub>2</sub>/año, considerando las cuatro principales tecnologías (solventes líquidos en escenarios optimista y realista, sorbentes sólidos convencionales y carbón activado), se presentan en la Tabla 6.2. Se determinó un horizonte de evaluación  $n$  de la planta de 10 años como un estándar basado en la durabilidad de los equipos y materiales, así como por el horizonte de amortización en proyectos industriales de captura [58].

Tabla 6.2: Costo nivelado de captura de CO<sub>2</sub> para una capacidad de 1 MtCO<sub>2</sub>/año.

Tecnología	Solvente líquido (optimista)	Solvente líquido (realista)	Sorbente sólido	Carbón activado
LCOC (USD/tCO <sub>2</sub> )	74	128	107	92

El análisis revela que el solvente líquido en un escenario optimista tiene el menor costo nivelado (\$74 USD/tCO<sub>2</sub>); sin embargo, su escalabilidad implica riesgos financieros significativos. En contraste, el solvente líquido en un escenario realista representa la opción más costosa (\$128 USD/tCO<sub>2</sub>) debido a mayores requerimientos energéticos y operativos. El sorbente sólido, con un costo de \$107 USD/tCO<sub>2</sub>, se posiciona como una alternativa intermedia, aunque su retorno de inversión puede verse comprometido por elevados costos iniciales y una capacidad de regeneración limitada. Por último, el carbón activado, con un costo nivelado de \$92 USD/tCO<sub>2</sub>, combina un bajo CAPEX y OPEX, mostrándose como una opción económica y viable para la captura directa de carbono del aire en las condiciones analizadas.

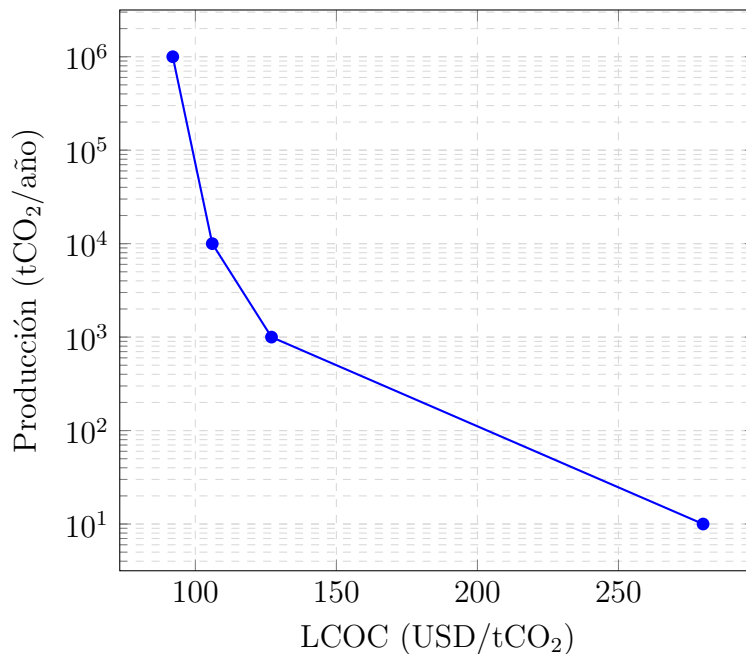


Figura 6.7: Costo nivelado para diferentes producciones utilizando carbón activado como adsorbente sólido.

La Figura 6.7 muestra el costo nivelado para cuatro niveles de producción: 10, 1.000, 10.000 y 1.000.000 toneladas de CO<sub>2</sub> por año utilizando carbón activado. A partir de la gráfica de costo nivelado de captura de CO<sub>2</sub>, se observa una disminución a medida que aumenta la escala de producción. Para una capacidad de producción de 10 tCO<sub>2</sub>/año, el costo es significativamente alto (\$280 USD/tCO<sub>2</sub>), lo que se atribuye a la dilución insuficiente de los costos fijos sobre un volumen reducido de captura. Conforme la producción se incrementa a 1.000 tCO<sub>2</sub>/año y 10.000 tCO<sub>2</sub>/año, el costo nivelado disminuye drásticamente a \$127 USD/tCO<sub>2</sub> y \$106 USD/tCO<sub>2</sub>, respectivamente. Finalmente, para una producción masiva de 1 MtCO<sub>2</sub>/año, se logra un costo de \$92 USD/tCO<sub>2</sub>, consolidando el carbón activado como una opción económica viable en escalas industriales.

# Capítulo 7

## Diseño de Equipo Escala Domiciliaria

En este capítulo se describe el diseño de un equipo a escala domiciliaria para evaluar la viabilidad técnica de sistemas de captura directa de aire (DAC), capaz de: (1) caracterizar la dinámica de adsorción de CO<sub>2</sub> en carbón activado bajo condiciones ambientales de temperatura, humedad y presión atmosférica, (2) registrar curvas de ruptura en tiempo real mediante sensores de concentración, y (3) cuantificar los parámetros críticos de operación (capacidad de adsorción, tiempo de ruptura, eficiencia energética). Adicionalmente, se analizarán los costos de inversión (CAPEX) y operación (OPEX), considerando: (i) fabricación de componentes estandarizados, (ii) consumo eléctrico del sistema de vacío/calentamiento (VSA), y (iii) vida útil del adsorbente.

### 7.1 Diseño del Sistema DAC-VSA

Se desarrolló un prototipo de Captura Directa de Aire (DAC) mediante Adsorción por Vacío (VSA), optimizado para estudios cinéticos y termodinámicos a escala domiciliaria. El sistema, construido en acrílico transparente de 2 mm de espesor (dimensiones 30 cm × 30 cm × 30 cm), integra las siguientes innovaciones respecto a diseños convencionales:

- **Geometría modular:** Lecho adsorbente de 3810 cm<sup>3</sup> con pellets en forma de monolitos de carbón activado (1.87 kg) fabricados mediante moldeo 3D, con canales de 5 mm y espesor de pared de 2.5 mm para maximizar el área de contacto gas-sólido.

- **Instrumentación avanzada:**
  - Sensor **SCD30** (Sensirion) para medición simultánea de CO<sub>2</sub> (precisión ±30 ppm), temperatura (±0.4 °C) y humedad (±3 % HR).
  - Sensor de presión **26PC Series** (Honeywell) con rango de 0 kPa to 100 kPa y salida diferencial para monitoreo en tiempo real de las fases de adsorción/desorción.
- **Control:** Válvulas check (V-1 y V-2 en Figura 7.4) y bomba de vacío de 1.8 CFM regulada por Arduino, permitiendo ciclos batch de 50 000 s (14 h) con transiciones precisas entre fases.

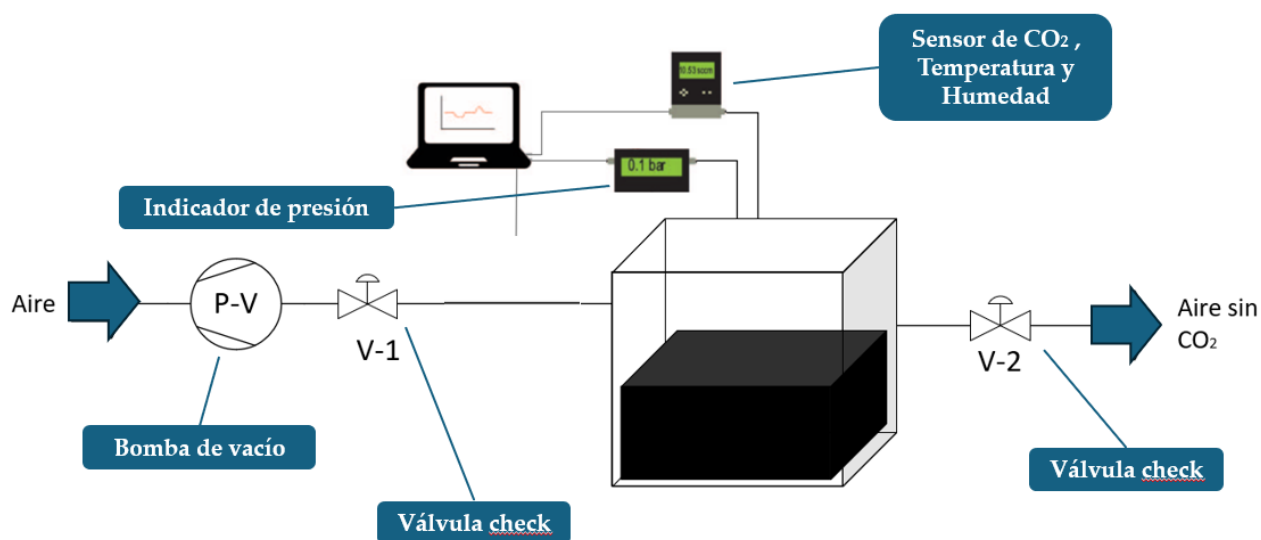


Figura 7.1: Configuración experimental del prototipo DAC-VSA. Se destacan: (1) Lecho monolítico de carbón activado, (2) Sensores SCD30 y 26PC, (3) Bomba de vacío, (4) Válvulas check.

Las especificaciones técnicas del aparato DAC se muestran en la Tabla 7.1. Durante el proceso de adsorción, el sistema alcanza un tiempo de 50.000 segundos, con una adsorción máxima de CO<sub>2</sub> de 18,42 mmg por cada ciclo para una concentración de entrada de 400 ppm de CO<sub>2</sub> en el aire.

## 7.2 Funcionamiento de Adsorción - Desorción

El proceso de captura y liberación de CO<sub>2</sub> mediante adsorción-desorción se lleva a cabo en ciclos batch, donde el gas es primero atrapado en un material adsorbente y posteriormente liberado mediante vacío. Este ciclo se divide en varias fases clave: la adsorción, en la cual el CO<sub>2</sub> se retiene en el lecho adsorbente, y la desorción, donde se aplica vacío para recuperar el gas capturado. A continuación, se describen detalladamente las etapas del proceso.

Parámetro	Valor	Dimensión
<b>Caja</b>		
Material	Acrílico	-
Ancho	30	cm
Largo	30	cm
Alto	30	cm
Volumen del aparato	27.000	cm <sup>3</sup>
Volumen de carbón activado	3.810	cm <sup>3</sup>
Volumen de aire	25.800	cm <sup>3</sup>
Moles iniciales de CO <sub>2</sub>	0,4219	mmol
Masa de carbón activado	1,87	kg
<b>Curva de ruptura</b>		
Tiempo de adsorción	50.000	s
Tiempo de adsorción	833	min
Tiempo de adsorción	14	h
Concentración de CO <sub>2</sub> promedio, C <sub>ave</sub>	0,01635	mol/m <sup>3</sup>
Concentración de CO <sub>2</sub> final, C <sub>final</sub>	0,01623	mol/m <sup>3</sup>
Capacidad máxima de adsorción, q <sub>adsorbido</sub>	0,7259	mol/m <sup>3</sup>
Moles adsorbidos de CO <sub>2</sub> del aire	0,4188	mmol
Moles finales de CO <sub>2</sub> en el aire	0,00315	mmol

Tabla 7.1: Especificaciones técnicas del diseño de la caja de adsorción y parámetros relacionados con la captura de CO<sub>2</sub>.

### 7.2.1 Inicio del ciclo batch

- **Estado Inicial:** El sistema está en reposo, con presión ambiente dentro de la caja.
- **Objetivo:** Capturar CO<sub>2</sub> del aire estancado y liberarlo mediante vacío.

### 7.2.2 Fase de adsorción

#### i. Estancamiento del Aire:

- Se abre la válvula de entrada y se introduce una cantidad fija de aire ambiente en la caja.
- La bomba de vacío está apagada durante esta fase.
- Se cierran las válvulas de entrada y salida para estancar el aire dentro de la caja.

#### ii. Medición de Condiciones Iniciales:

- El sensor de presión interna mide la presión inicial del aire estancado.
- El sensor de CO<sub>2</sub> mide la concentración inicial de CO<sub>2</sub> en el aire.

### iii. Adsorción de CO<sub>2</sub>:

- El aire estancado fluye a través del lecho de carbón activado, donde el CO<sub>2</sub> es adsorbido.
- El sensor de CO<sub>2</sub> monitorea la disminución de la concentración de CO<sub>2</sub> en el aire dentro de la caja.

### iv. Final de la Adsorción:

- Cuando la concentración de CO<sub>2</sub> en el aire estancado alcanza un nivel mínimo, se considera que la adsorción ha finalizado.

## 7.2.3 Fase de desorción

### i. Aplicación de Vacío:

- Se activa la bomba de vacío conectada a la entrada de aire.
- La válvula de entrada se cierra para evitar que el aire exterior ingrese al sistema.
- La válvula de salida se abre para permitir la salida del CO<sub>2</sub> liberado.

### ii. Liberación de CO<sub>2</sub>:

- A medida que la presión disminuye, el CO<sub>2</sub> adsorbido se libera del carbón activado.
- El sensor de CO<sub>2</sub> mide la concentración de CO<sub>2</sub> liberado.

### iii. Recolección o Liberación de CO<sub>2</sub>:

- El CO<sub>2</sub> liberado puede ser recolectado en un tanque o liberado al exterior, dependiendo del diseño del sistema.

## 7.2.4 Fin del ciclo batch

- **Restablecimiento:** Se restablece la presión interna a la presión ambiente.
- El sistema está listo para comenzar un nuevo ciclo de adsorción.

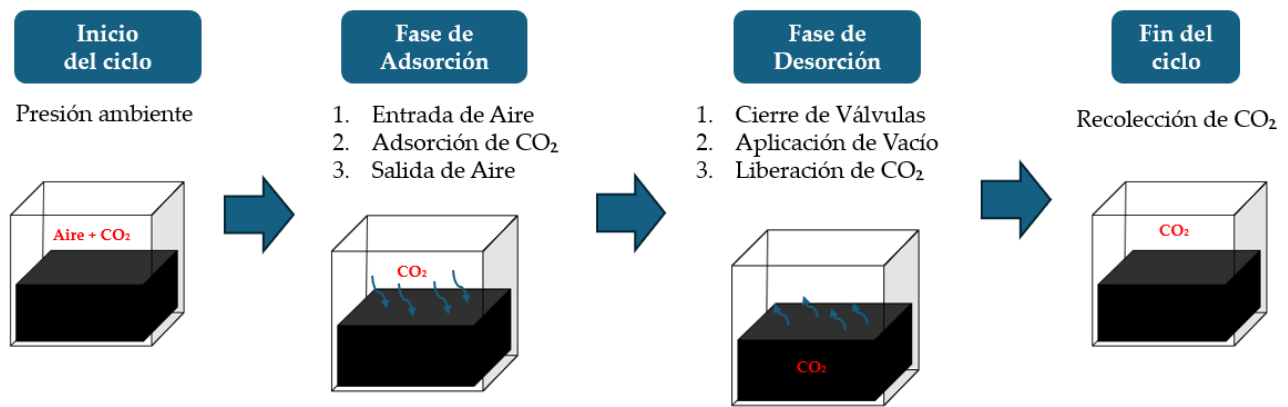


Figura 7.2: Proceso de captura en funcionamiento VSA.

### 7.3 Curva de Ruptura

La curva de ruptura del sistema se obtuvo mediante el modelo escalado de MATLAB, que muestra cómo varía la concentración de CO<sub>2</sub> adsorbido a lo largo del tiempo, se presenta en la Figura 7.3. Este gráfico permite observar el comportamiento dinámico del proceso de adsorción durante un ciclo completo. Como material adsorbente, se elige el carbón activado de cáscara de coco debido a su alta capacidad de adsorción de CO<sub>2</sub>, principalmente por su estructura microporosa desarrollada a través de un sencillo proceso de activación con CO<sub>2</sub>. Este material presenta una superficie específica entre 686 y 1.327 m<sup>2</sup>/g y un volumen de microporos que varía entre 0,31 y 0,65 cm<sup>3</sup>/g, lo que permite optimizar sus propiedades para aplicaciones de captura de CO<sub>2</sub>. La máxima adsorción alcanzada por estos carbones es de 5,6 mmol/g a 0°C y 760 mmHg, lo que es comparable con otros carbones de origen vegetal, destacando su eficiencia [37].

A continuación, en la Figura 7.4 se presenta el layout del aparato DAC a escala domiciliaria propuesto para la captura de dióxido de carbono y el monitoreo de la curva de ruptura dentro del lecho de carbón activado. El diseño incluye detalles sobre la disposición de los principales componentes del sistema, como los sensores de monitoreo, los mecanismos de control de flujo, y los dispositivos de regulación de presión. Además, se incluyen las conexiones necesarias para el sellado adecuado, garantizando un sistema hermético que evite fugas durante las pruebas. Este diseño asegura la integridad del aparato y facilita su operación segura en condiciones controladas, permitiendo la realización de experimentos y mediciones.

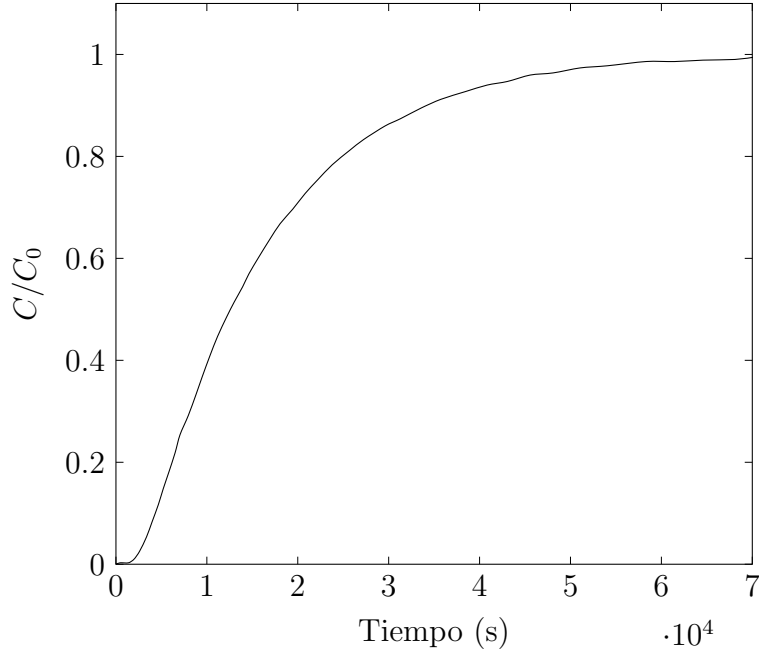


Figura 7.3: Tiempo de ruptura del aparato DAC a escala domiciliaria.

## 7.4 CAPEX, OPEX y Costo Nivelado

El análisis de los costos de inversión (CAPEX) y los costos operativos (OPEX) es fundamental para evaluar la viabilidad económica del aparato DAC a escala domiciliaria propuesto. El CAPEX incluye los costos iniciales de los materiales y equipos necesarios para el funcionamiento del sistema, tales como el acrílico, el carbón activado y los componentes del sistema VSA (bomba de vacío, sensores, válvulas, termostato, etc.). Estos equipos son cruciales para la adsorción y desorción del CO<sub>2</sub>, y su costo inicial es una parte esencial para calcular la rentabilidad del proyecto a largo plazo. En la Tabla A.1 del Anexo A se desglosa el costo de los equipos y materiales necesarios para la creación del aparato DAC a escala domiciliaria.

El OPEX, por otro lado, considera los costos asociados con el consumo de energía eléctrica y el mantenimiento. Ambos costos son necesarios para determinar el costo nivelado del CO<sub>2</sub> capturado. El OPEX general del equipo se presenta en la Tabla A.2 del Anexo A. Finalmente a modo de resumen, la Figura 7.5 presenta la distribución de los costos asociados al aparato, desglosados en costos de capital (CAPEX) y costos operativos (OPEX). Los datos están normalizados al costo en USD por gramo de CO<sub>2</sub> capturado en un año, considerando un horizonte de evaluación del equipo de 10 años.

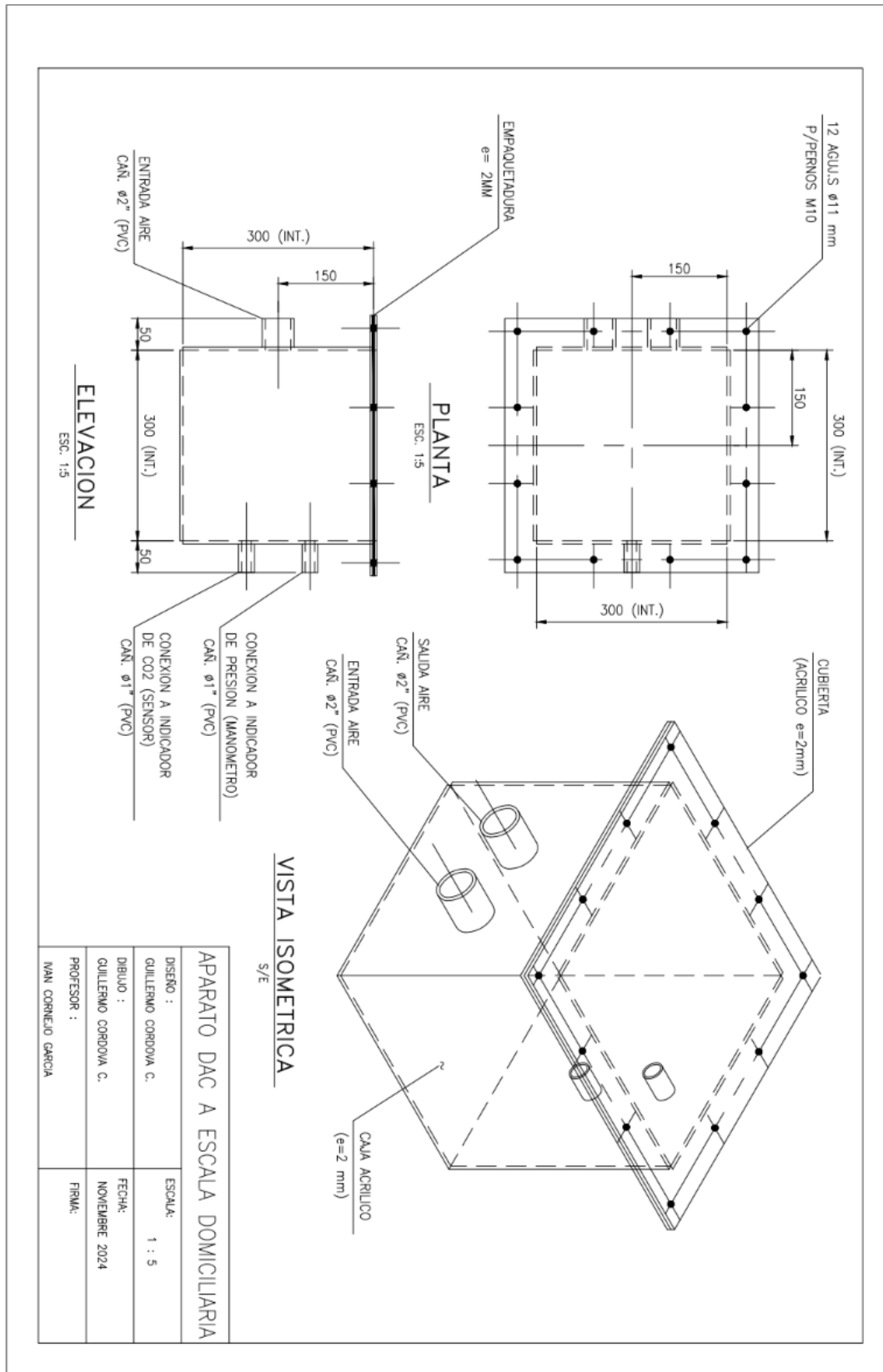


Figura 7.4: Layout del prototipo de captura de dióxido de carbono DAC a escala domiciliaria.

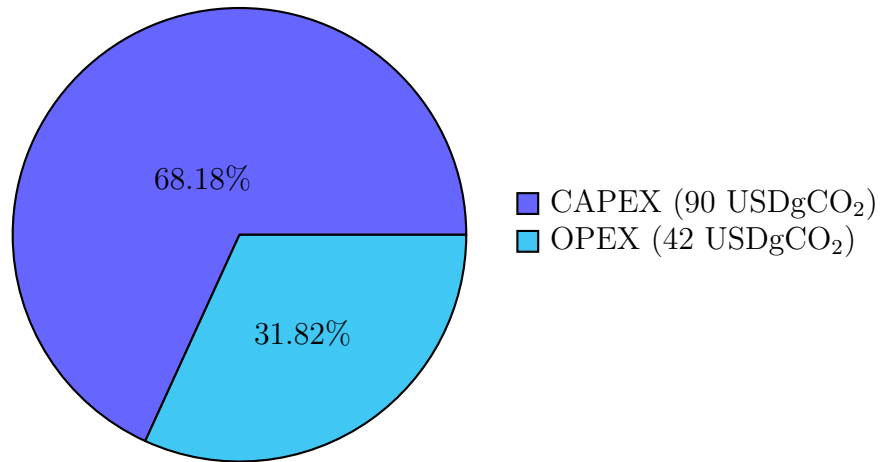


Figura 7.5: Distribución de los Costos Totales de CAPEX y OPEX del aparato DAC a escala domiciliaria.

El análisis indica que, aunque el costo inicial del CAPEX es bajo en comparación con el OPEX anual, este último tiene un impacto acumulativo considerable a lo largo del horizonte de evaluación del sistema. En conjunto, el costo nivelado del aparato de captura DAC a escala domiciliaria asciende a \$1.357 USD por gramo de CO<sub>2</sub> capturado.

El aparato DAC diseñado es particularmente adecuado para realizar pruebas de curvas de ruptura e isothermas de adsorción, gracias a su capacidad para monitorear y controlar parámetros operativos, como presión, temperatura y concentración de CO<sub>2</sub>. Elementos como la válvula reguladora de aire, la bomba de vacío y el termostato garantizan condiciones experimentales precisas, eliminando sesgos en los resultados. Además, su diseño modular facilita configuraciones ajustables, permitiendo el estudio de diferentes adsorbentes, como en este caso el carbón activado de cáscara de coco, y diversas geometrías de lecho, lo que lo convierte en un prototipo versátil para investigaciones futuras. Las curvas de ruptura generadas con este aparato resultan fundamentales para evaluar la eficiencia del adsorbente y el comportamiento del sistema bajo régimen batch, ya que permiten establecer la concentración de salida en función del tiempo y determinar el punto de saturación del adsorbente. Por otro lado, la medición de las isothermas de adsorción obtenidas bajo condiciones controladas permiten medir la capacidad máxima de adsorción del adsorbente y su desempeño a distintas concentraciones. Finalmente, el diseño del aparato replica condiciones a escala domiciliaria, lo que lo hace representativo para aplicaciones prácticas.

# Capítulo 8

## Conclusiones y Recomendaciones

La tecnología TVSA fue seleccionada por ser una de las más utilizadas en DAC a nivel industrial, destacando por su menor consumo energético ( $0.18 \text{ MWh/tCO}_2$ ), tiempos de regeneración más rápidos (al combinar vacío y calor) y costos competitivos ( $\$92 - \$106 \text{ tCO}_2$ ). Su eficiencia probada en plantas reales, como las de Climeworks, y su adaptabilidad a escalas industriales la convierten en la opción óptima para maximizar la captura de  $\text{CO}_2$  con carbón activado.

El modelo computacional para simular la captura de  $\text{CO}_2$  en un lecho monolítico de carbón activado basado en madera demuestra ser efectivo para predecir el tiempo de ruptura en condiciones isotérmicas y flujo laminar. Sin embargo, es necesario ajustar la velocidad del canal en un factor de 10 para alinear los resultados con datos experimentales, lo que revela pequeñas discrepancias, especialmente en el adelanto del tiempo de adsorción, lo cual podría estar relacionado con la difusividad del gas. Aun así, el modelo muestra un comportamiento consistente y fiable, validando su potencial para optimizar la captura de  $\text{CO}_2$  en monolitos de carbón activado.

El análisis económico demuestra que la captura de  $\text{CO}_2$  con carbón activado es una opción competitiva frente a otras tecnologías, como la absorción química con solventes acuosos, especialmente en aplicaciones de mayor escala. La escalabilidad del sistema se traduce en una mejora significativa de la rentabilidad, ya que los costos nivelados de captura (LCOE) disminuyen considerablemente, pasando de  $280 \text{ USD/tCO}_2$  a  $106 \text{ USD/tCO}_2$  al incrementar la capacidad de 10 a  $10.000 \text{ tCO}_2/\text{año}$ . Esto consolida su viabilidad para instalaciones industriales de gran tamaño. Sin embargo, a menor escala, esta tecnología enfrenta limitaciones económicas debido al impacto de los costos asociados a los equipos auxiliares necesarios para el proceso, como ventiladores, bombas de vacío

e intercambiadores de calor, los cuales incrementan significativamente los costos de operación. Este análisis enfatiza que, aunque la tecnología es prometedora en términos de escalabilidad y competitividad, su implementación debe enfocarse en escenarios de mayor capacidad para maximizar sus beneficios económicos y reducir las barreras asociadas al costo en aplicaciones de menor tamaño

El diseño propuesto para un sistema de captura directa de CO<sub>2</sub> a escala domiciliaria, basado en carbón activado de cáscara de coco, presenta características técnicas promisorias, con una adsorción máxima de 18,42 mmg de por CO<sub>2</sub> cada ciclo, en ciclos de 14 horas. Sin embargo, el análisis económico revela limitaciones significativas, con un costo nivelado estimado de 1357 USD/gCO<sub>2</sub> considerando horizonte de evaluación de 10 años, lo que cuestiona su viabilidad práctica en aplicaciones reales. Aunque el sistema cumple con su propósito experimental, se requiere optimizar tanto el diseño como el material adsorbente para mejorar la viabilidad económica y reducir los costos asociados.

Como recomendación para mejorar el diseño del aparato es adoptar un sistema de adsorción por cambio térmico y vacío (TVSA), que podría ofrecer mayor eficiencia al combinar desorción térmica con vacío, optimizando el uso energético y reduciendo los tiempos de regeneración. Además, un diseño de lecho cilíndrico doble, operando en régimen semicontinuo, permitiría una captura más representativa de sistemas industriales DAC, al alternar entre adsorción y desorción sin interrupciones. De esta forma se aumentaría la capacidad operativa del equipo y también reduciría el tiempo de operación que un régimen batch, acercándose más a los estándares de aplicaciones industriales a mayor escala.

Los resultados obtenidos corroboran que la captura de CO<sub>2</sub> directamente del aire con carbón activado es económicamente conveniente a escala industrial, destacándose la escalabilidad como un factor clave para reducir significativamente los costos. A escala domiciliaria, si bien se logra una alta eficiencia de captura, los elevados costos iniciales y operativos confirman las limitaciones previamente conocidas de esta tecnología en aplicaciones de pequeña escala. Sin embargo, el trabajo realizado permite cuantificar con precisión estos costos y eficiencias, proporcionando un punto de partida para futuras optimizaciones en diseño y operación que puedan mejorar su viabilidad práctica.

# Referencias

- [1] United Nations Environment Programme. Emissions gap report 2023: Broken record – temperatures hit new. <https://wedocs.unep.org/handle/20.500.11822/43922>, 2023. Obtenido de <https://wedocs.unep.org/handle/20.500.11822/43922>.
- [2] G. De Silva, P.G. Ranjith, and M.S.A. Perera. Geochemical aspects of co2 sequestration in deep saline aquifers: A review. 2015.
- [3] Global Carbon Budget. Annual co2 emissions. <https://ourworldindata.org/co2-emissions>, 2023. Obtenido de <https://ourworldindata.org/co2-emissions>.
- [4] United Nations. Aprobación del acuerdo de parís. [https://unfccc.int/sites/default/files/english\\_paris\\_agreement.pdf](https://unfccc.int/sites/default/files/english_paris_agreement.pdf), 2016.
- [5] L. Corinne and P. Friedlingstein. Earth system science data. *Nature Reviews Earth & Environment*, 2:314–324, 2021.
- [6] Christoph Beuttler, Louise Charles, and Jan Wurzbacher. The role of direct air capture in mitigation of anthropogenic greenhouse gas emissions. *Frontiers in Climate*, 1:00010, 2019. This article is part of the Research Topic: The Role of Negative Emission Technologies in Addressing Our Climate Goals.
- [7] GIZ. Análisis de la captura de carbono para la producción de combustibles sintéticos en Chile. <https://www.giz.de/en/workingwithgiz/71661.html>, 2021.
- [8] M. Ram, T. Galimova, D. Bogdanov, M. Fasihi, A. Gulagi, C. Breyer, and K. Crone. Powerfuels in a renewable energy world: Global volumes, cost, and trading 2030 to 2050. *Berlín*, 2020.
- [9] G. Galán, M. Martín, and I. Grossmann. *Systematic comparison of natural and engineering methods of capturing CO2 from the air and its utilization*. ScienceDirect, Pittsburgh, 2023.

- [10] International Energy Agency. Energy technology perspectives: Special report on carbon capture utilisation and storage. 2020.
- [11] N. McQueen, K. V. Gomes, C. McCormick, K. Blumanthal, M. Pisciotta, and J. Wilcox. A review of direct air capture (dac): Scaling up commercial technologies and innovating for the future. *Pennsylvania*, 2021.
- [12] D. García. Diseño de un equipo escala laboratorio para la captura de co2 atmosférico mediante materiales adsorbentes. *Santiago de Chile*, 2022.
- [13] V. Gutknecht, S. Snæbjörnsdóttir, B. Sigfússon, E. S. Aradóttir, and L. Charles. Creating a carbon dioxide removal solution by combining rapid mineralization of CO<sub>2</sub> with direct air capture. *Energy Procedia*, 153:25–30, 2018.
- [14] D. Keith, G. Holmes, D. Angelo, and K. Heidel. A process for capturing CO<sub>2</sub> from the atmosphere. *Joule*, 2018. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.joule.2018.05.006>.
- [15] Farzan Kazemifar. A review of technologies for carbon capture, sequestration, and utilization: Cost, capacity, and technology readiness. *San José State University*, 2023.
- [16] U. Khan, C. Ogbaga, O.-A. O. Abiodun, A. Adeleke, P. Ikubann, P. Okoye, and J. Okolie. Assessing absorption-based co2 capture: Research progress and techno-economic assessment overview. *Kraków, Poland*, 2023.
- [17] The National Academies Press. Negative emissions technologies and reliable sequestration: A research agenda. 2019.
- [18] Mai Bui and Niall Mac Dowell. *Introduction – Carbon Capture and Storage*. Centre for Environmental Policy, Imperial College London, London, UK, 2024. Email: [niall@imperial.ac.uk](mailto:niall@imperial.ac.uk).
- [19] National Aeronautics and Space Administration (NASA). About nasa’s mission. <https://www.nasa.gov/>, 2024. Accessed: 2024-11-21.
- [20] Hannah Ritchie and Max Roser. Co emissions. *Our World in Data*, 2020. <https://ourworldindata.org/co2-emissions>.
- [21] Ministerio del Medio Ambiente de Chile. Tendencia nacional de las emisiones de gases de efecto invernadero en Chile 1990-2022. Primer Informe Bienal de Transparencia y Documento del Inventario Nacional de Chile 1990-2022, 2024. Presentado ante la CMNUCC en diciembre de 2024 en cumplimiento con el Acuerdo de París, Artículo 13, párrafo 7, 2015.

- [22] Praveen Bains, Peter Psarras, and Jennifer Wilcox. Co2 capture from the industry sector. *Petroleum Engineering and Carbon Sequestration*, 36(3):147–153, 2017. Corresponding author: jen.wilcox@stanford.edu, wilcox@mines.edu.
- [23] G. Li and J. Yao. Direct air capture (dac) for achieving net-zero co2 emissions: Advances, applications, and challenges. *Engineering*, 5:1298–1336, 2024.
- [24] Department of Carbon Management. *Captura Directa del Aire (DAC)*, July 2023.
- [25] Eadbhard Pernot and Marc Jaruzel. La captura directa de aire está creciendo en todo el mundo, pero se necesita más apoyo político. *Climeworks, Suiza*, julio 2022. Área de trabajo: Captura de carbono.
- [26] May-Yin (Ashlyn) Low, Lucy Victoria Barton, Ronny Pini, and Camille Petit. Analytical review of the current state of knowledge of adsorption materials and processes for direct air capture. *Chemical Engineering Research and Design*, 191:114–132, November 2022. This is an open access article under the CC BY license (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).
- [27] Keju An, Kai Li, Cheng-Min Yang, Jamieson Brechtel, and Kashif Nawaz. A comprehensive review on regeneration strategies for direct air capture. *Review Article*, 2024. Preprint.
- [28] Jan F. Wiegner, Alexa Grimm, Lukas Weimann, and Matteo Gazzani. Optimal design and operation of solid sorbent direct air capture processes at varying ambient conditions. *Industrial Engineering Chemistry Research*, 61(32):12649–12667, 2022. Read Online.
- [29] Y. Y., Perera S. P. Li, and B. D. Crittenden. *Zeolite Monoliths for Air Separation*. ScienceDirect, Bath, UK, 1998.
- [30] G. Polak, P. Baran, J. Szczurowski, and K. Zarebska. Advancements in gas phase pollutant removal: A comprehensive study on the sorption of CO2 and SO2 on modified carbon monoliths. *Chemical Engineering Journal*, 82:112–126, 2024.
- [31] L. Martín. *Conversión de CO2 a Combustibles Líquidos*. Escuela Técnica Superior de Ingenieros, Spain, 2024.
- [32] I. Grossmann and otros. Innovative monolithic contactors for co2 capture. *Chemical Engineering Journal*, 78:112–126, 2023.
- [33] NGK INSULATORS. Ceramic substrates for direct air capture (dac) systems to capture co2 from the atmosphere. <https://www.ngk-insulators.com/>, 2024. Accessed: 2024-12-01.

- [34] R. Treybal. *Operaciones de Transferencia de Masa*. McGraw-Hill, Universidad de Rhode Island, Estados Unidos, 1986.
- [35] Jia Yen Lai, Lock Hei Ngu, and Siti Salwa Hashim. A review of co<sub>2</sub> adsorbents performance for different carbon capture technology processes conditions. *Greenhouse Gas Science and Technology*, 0:1–41, 2021. Additional supporting information may be found online in the Supporting Information section at the end of the article.
- [36] R. Ben-Mansour, M.A. Habib, O.E. Bamidele, M. Basha, N.A.A. Qasem, A. Peedikakkal, T. Laoui, and M. Ali. Carbon capture by physical adsorption: Materials, experimental investigations and numerical modeling and simulations – a review. *Elsevier Ltd.*, 2015:1–15, 2015.
- [37] Aimé Serge Ello, Luiz K.C. de Souza, Albert Trokourey, and Mietek Jaroniec. Coconut shell-based microporous carbons for co<sub>2</sub> capture. *Microporous and Mesoporous Materials*, 184:1–9, 2013. Received 14 February 2013; Revised 2 July 2013; Accepted 3 July 2013; Available online 16 July 2013.
- [38] Augustine Ntiamoah, Jianghua Ling, Penny Xiao, Paul A. Webley, and Yuchun Zhai. CO<sub>2</sub> Capture by Temperature Swing Adsorption: Use of Hot CO<sub>2</sub>-Rich Gas for Regeneration. *Cooperative Research Centre for Greenhouse Gas Technologies (CO<sub>2</sub>CRC)*, 2016. \*Corresponding author: Paul A. Webley.
- [39] Rafael M. Siqueira, Geovane R. Freitas, Hugo R. Peixoto, Jailton F. do Nascimento, Ana Paula S. Musse, Antonio E. B. Torres, Diana C. S. Azevedo, and Moises Bastos-Neto. Carbon dioxide capture by pressure swing adsorption. In *13th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-13*, pages 14–18, Lausanne, Switzerland, November 2016. Universidade Federal do Ceará.
- [40] Junpeng Tian, Yuanhui Shen, Donghui Zhang, and Zhongli Tang. Co<sub>2</sub> capture by vacuum pressure swing adsorption from dry flue gas with a structured composite adsorption medium. *Journal of Cleaner Production*, 2022.
- [41] Sean M.W. Wilson. High purity co<sub>2</sub> from direct air capture using a single tvsa cycle with na-x zeolites. *Separation and Purification Technology*, 294:121186, 2022.
- [42] J. Seader and E. Henley. *Separation Process Principles*. John Wiley & Sons, Inc., Nueva Jersey, Estados Unidos, 2006.
- [43] J. De Boer. *The Dynamical Character of Adsorption*. Oxford University Press, Oxford, 1968.

- [44] P. Martínez and E. Rus. *Operaciones de Separación en Ingeniería Química*. Pearson: Prentice Hall, Málaga, España, 2004. Universidad de Málaga.
- [45] Sina Esfandiar Pour, Alireza Haghghat Mamaghani, and Zaher Hashisho. Modeling of adsorption process on monolith adsorbents: A mini-review. *Review*, 2024.
- [46] Y. Niño. Método de los volúmenes finitos: Modelación numérica en ingeniería hidráulica y ambiental. *Sem. Primavera*, 2002. CI71D.
- [47] Victor Duong and Mohammed Afzal Khan. Cfd simulation of flow and temperature inside a monolith of an exhaust after-treatment system (eats). Master's thesis, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden, 2019. Master's thesis in Innovative and Sustainable Chemical Engineering.
- [48] COMSOL. COMSOL Multiphysics. <https://www.comsol.com>. Accedido: 2024-06-16.
- [49] Ansys. Ansys Fluent. <https://www.ansys.com/products/fluids/ansys-fluent>. Accedido: 2024-06-16.
- [50] MathWorks. MATLAB. <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>. Accedido: 2024-06-16.
- [51] Tagg K. Lee. Direct air capture: Catalyzing a carbon negative future. *Civil and Environmental Engineering Publications*, 223, 2023. Part of the Chemical Engineering Commons and the Civil and Environmental Engineering Commons.
- [52] Hyungwoong Ahn and Stefano Brandani. Dynamics of carbon dioxide breakthrough in a carbon monolith over a wide concentration range. *Department of Chemical Engineering, University College London*, 2005.
- [53] S. Roy and A. Moharir. Modeling the generic breakthrough curve for adsorption process. 2019.
- [54] Rui P. Ribeiro, Ticiane P. Sauer, Filipe V. Lopes, Regina F. Moreira, Carlos A. Grande, and Alírio E. Rodrigues. Adsorption of  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CH}_4$ , and  $\text{N}_2$  in activated carbon honeycomb monolith. *Journal of Chemical Engineering Data*, 53(9):2311–2317, 2008. Published on Web 09/04/2008.
- [55] Houssam Bouaboula, Jamal Chaouki, Youssef Belmabkhout, and Abdelghafour Zaabout. Comparative review of direct air capture technologies: From technical, commercial, economic, and environmental aspects. *Applied Chemistry and Engineering research Centre of Excellence (ACER CoE)*, 2023. \*Corresponding author.

- [56] A. et al. Smith. Cyclic stability of activated carbon in tvsa-based dac systems. *Journal of CO2 Utilization*, 45:101234, 2021.
- [57] B. Jones and C. Zhang. Linear scaling laws for adsorption in direct air capture. *Chemical Engineering Science*, 227:115940, 2020.
- [58] Jen Wilcox. Direct air capture. In *Workshop on Direct Air Capture (DAC)*, Washington, DC, July 24 2019. Department of Energy (DOE), Worcester Polytechnic Institute. Presented at the Workshop on DAC.

# Apéndice A

## Costos del Aparato DAC a Escala Domiciliaria

### A.1 Costos de fabricación del aparato DAC

A continuación, en la Tabla A.1 se presentan las cotizaciones para la fabricación e instalación del aparato DAC a escala domiciliaria.

Tabla A.1: Costos de los equipos utilizados en la caja experimental para la captura de CO<sub>2</sub>.

<b>Equipos y Materiales (VSA)</b>		
<b>Equipo</b>	<b>Costo Unitario (USD)</b>	<b>Cantidad</b>
Acrílico (2 mm de espesor)	13.360/m <sup>3</sup>	0,00064 m <sup>3</sup>
Carbón Activado de Cáscara de Coco	6,14/kg	1,87 kg
Bomba de vacío 1.8 CFM VALUE -VE115N	130	1
Sensor de CO <sub>2</sub> , T° y humedad Sensirion SCD30	48	1
Sensor de Presión Honeywell 26PC Series	118	1
Válvula reguladora de presión Swagelok	20	1
Manómetro de presión	10	1
Válvula check de retención	5	1
Distribuidor mido De Latón De 2 Vías Con Acopl	19	1
Termostato Digital Stc-1000 Control Temperatura	8	1
Resistencia Eléctrica 800w Acumulador De Calor	57	1
Selladores (juntas, silicona)	5	1
<b>Total</b>	<b>442 USD</b>	<b>-</b>

## A.2 Costos de operación del aparato DAC

A continuación, en la Tabla A.2 se presentan los costos de operación del aparato DAC a escala domiciliaria.

Tabla A.2: Costos de Energía Operativa (OPEX) Anuales

<b>OPEX Anual del aparato DAC a escala domiciliaria</b>		
<b>Componente</b>	<b>Consumo Energético (kWh)</b>	<b>Costo Total (USD)</b>
Energía Adsorción - Desorción	0,001583 kWh/ciclo	0,199 \$ / ciclo
Sensor de CO <sub>2</sub> , T° y humedad	0,003819 kWh	0,575 \$ / año
Sensor de Presión	0,0007638 kWh	0,0039 \$ / año
<b>Total Energía Equipos</b>	0,574 kWh/año	0.575 \$
Costo Total OPEX por Ciclo	-	0,774 \$ / ciclo
Costo Total OPEX Anual	-	164,74 \$ / año

# Apéndice B

## Dimensionamiento Captura de Carbono

### B.1 Estimación de consumo de carbón activado para distintas producciones

A continuación, en la Tabla B.1 se presentan los cálculos para la estimación del consumo de carbón activado para distintas producciones de tonCO<sub>2</sub> de captura DAC.

Tabla B.1: Dimensionamiento de plantas de captura de CO<sub>2</sub> a partir de carbón activado.

<b>Parámetro</b>	<b>Producción 10 ton CO<sub>2</sub>/año</b>	<b>Producción 1.000 ton CO<sub>2</sub>/año</b>	<b>Producción 10.000 ton CO<sub>2</sub>/año</b>	<b>Producción 1.000.000 ton CO<sub>2</sub>/año</b>
Volumen de aire procesado por lecho (m <sup>3</sup> /año)	4.730	473.000	4.730.000	473.000.000
Número de lechos requeridos	73	7.281	72.806	7.280.569
Capacidad de adsorción por lecho (mol CO <sub>2</sub> /año)	3.434	3.434	3.434	3.434
Masa de carbón activado por lecho (kg)	1.568	156.800	1.568.000	156.800.000
Masa total de carbón activado (kg)	114	11.468	114.680	11.468.057
Costo de lecho de carbón activado (USD)	7,37	7,37	7,37	7,37
Costo de carbón activado por tonelada de CO <sub>2</sub> capturado (USD/ton CO <sub>2</sub> )	84	84	84	84