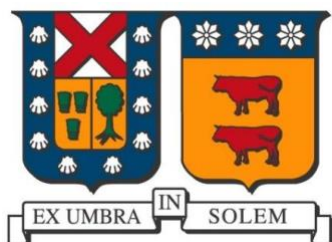


**UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA
MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y
AMBIENTAL
SANTIAGO-CHILE**



**Evaluación de la Viabilidad de Tecnologías de
Adsorción por Captura Directa de CO₂ para la
Industria Chilena**

VICENTE RODOLFO CASTRO MARDONES

MEMORIA DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL QUÍMICO

PROFESOR GUÍA: DR. GONZALO NÚÑEZ MONTOYA
PROFESOR CORREFERENTE: DR. IVÁN CORNEJO GARCÍA

Junio – 2026



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 de la viabilidad de tecnologías de adsorción por Captura Directa de CO₂ para la industria chilena

Nombre del candidato(a): Vicente Rodolfo Castro Mardones

Carrera / Grado: Ingeniería civil Química

Campus: San Joaquín **Departamento:** Departamento de Ingeniería Química y Ambiental

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Gonzalo Núñez Montoya, 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 (marcar una opción)

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

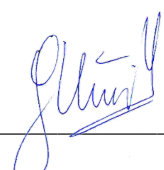
☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

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

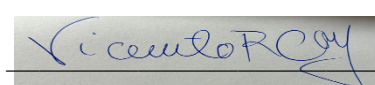
Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

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

Fecha: 21/09/2026 Firma: 

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 21.09.2026 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.

AGRADECIMIENTOS

A mi mamá, por el apoyo incondicional en las buenas y en las malas. Por cada detalle, grande y pequeño, que hizo posible que yo pudiera concentrarme en esto.

A Nacho, por su presencia y su apoyo constante.

A mi hermana Bárbara y su pareja Emilio, y a mi hermano Matías y su pareja Karen, por estar siempre cerca.

A mi papá, que desde Puerto Montt me acompañó a la distancia con su cariño y respaldo. Aunque nos vemos poco, su apoyo se siente.

A Carlos, por la ayuda en los comienzos de este trabajo, cuando el modelo era solo una idea sin forma y había que darle estructura. Esa partida fue muy importante para mí.

A Hugo, por las horas dedicadas a resolver problemas juntos cuando la memoria se ponía cuesta arriba.

Al profesor Gonzalo Núñez, por la guía y las correcciones que le dieron dirección a este trabajo.

Finalmente, a quienes me acompañaron durante la carrera. No fue un camino fácil, hubo períodos en que tuve que compatibilizar trabajo y estudios, y momentos donde las energías no alcanzaban. Pero se llegó.

DEDICATORIA

A mi mamá, por estar siempre. En cada momento difícil de este proceso, su apoyo fue lo que me mantuvo de pie.

RESUMEN

Esta memoria evalúa la viabilidad técnica y económica de un sistema de Captura Directa del Aire (DAC) basado en el ciclo de Adsorción por Oscilación de Vacío y Temperatura (VTSA) con sorbente amínico funcionalizado, mediante simulación dinámica del proceso.

Se desarrolló un modelo dinámico unidimensional con balances acoplados de masa y energía, isothermas de equilibrio $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ y las ocho etapas del ciclo VTSA, validado mediante balance de masa. La simulación reproduce la propagación de la zona de transferencia de masa, la convergencia al estado estacionario en el segundo ciclo y la respuesta paramétrica coherente con la química del sorbente amínico.

Los resultados operacionales muestran una capacidad cíclica estacionaria de 0,880 mmol/g, factor de utilización del 74% y tiempo de ciclo de 384 minutos. La operación continua requiere 3 lechos en paralelo con desfase de 82 minutos. La humedad relativa es la variable de mayor impacto (35% de variación), con máximo a 60% HR por favorecimiento del mecanismo de bicarbonato. La condición de máxima capacidad no coincide con la de mínimo costo energético de regeneración.

La evaluación económica se realiza para una planta piloto mediana de $\sim 10 \text{ tCO}_2/\text{día}$, escala derivada directamente de los resultados de simulación (66 columnas, 3 grupos $\times$ 22, desfase 82 min). El CAPEX asciende a USD 8,1 M y el costo de captura a USD 312/t CO_2 . El precio de equilibrio financiero de USD 426/t CO_2 se ubica dentro del rango del mercado voluntario actual (USD 400–1.000/t CO_2), viable a precios de mercado superiores a USD 426/t CO_2 . La escala de producción es la variable más determinante del punto de equilibrio: 96 columnas reducen el precio de equilibrio a USD 383/t.

ABSTRACT

This thesis evaluates the technical and economic feasibility of a Direct Air Capture (DAC) system based on the Vacuum Temperature Swing Adsorption (VTSA) cycle using an amine-functionalized cellulose nanofiber sorbent, through dynamic process simulation.

A one-dimensional dynamic model with coupled mass and energy balances, multicomponent CO₂/H₂O equilibrium isotherms (Toth and GAB), and all eight VTSA cycle stages was developed and validated through mass balance analysis with residuals below 2%.

Simulation results show a cyclic capacity of 0.880 mmol/g at steady state, a sorbent utilization factor of 74%, and a total cycle time of 384 minutes. Continuous operation requires 3 parallel beds with an 82-minute phase offset. Parametric analysis identifies relative humidity as the most critical variable (35% capacity variation), with a maximum at 60% RH consistent with the bicarbonate formation mechanism of amine sorbents. The condition of maximum capture capacity does not coincide with minimum regeneration energy cost.

Economic assessment is performed for a medium pilot plant of ~10 tCO₂/day, a scale derived directly from simulation results (66 columns, 3 groups × 22, 82-min offset). CAPEX totals USD 8.1 M and the capture cost is USD 312/tCO₂. The financial break-even price of USD 426/tCO₂ falls within the current voluntary carbon market range (USD 400–1,000/tCO₂), confirming economic viability at this scale. Production scale is the most sensitive variable: 96 columns reduce the break-even to USD 383/tCO₂.

ÍNDICE DE CONTENIDOS

1. INTRODUCCIÓN.....	13
2. OBJETIVOS.....	24
2.1. Objetivo general	24
2.2. Objetivos específicos	24
3. ESTADO DEL ARTE	25
3.1. Panorama global de las tecnologías de captura DAC.....	26
3.2. Fundamentos teóricos de la adsorción en la captura de CO ₂	32
3.3. Materiales adsorbentes para DAC	36
3.4. Efecto de las Condiciones Ambientales	41
3.5. Tecnologías de Adsorción Sólida en DAC.....	43
3.6. Modelación y simulación de tecnologías DAC	45
3.7 Brechas	48
4. METODOLOGÍA.....	49
4.1. Diseño de la simulación.....	49
4.1.1. Formulación de balances acoplados	52
4.1.2. Isotermas y competencia CO ₂ –H ₂ O.....	59
4.1.3. Condiciones de frontera e hipótesis operacionales.....	62
4.2. Implementación numérica y validación conceptual	66
4.2.1 Requerimientos computacionales	69
4.2.2. Estabilidad, convergencia y reproducibilidad	69
4.2.3. Validación del modelo.....	70
4.3. Análisis de sensibilidad, escalamiento conceptual y alcances metodológicos	71

4.3.1. Diseño experimental	71
4.3.2. Alcances y limitaciones metodológicas.....	74
5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	77
5.1 Validación del modelo	77
5.2 Curva de ruptura y eficiencia de captura	80
5.3 Perfiles de concentración y carga en el lecho	82
5.4 Co-adsorción CO ₂ –H ₂ O y efecto de la humedad	85
5.5 Evolución espaciotemporal de la concentración de CO ₂	87
5.6 Dinámica térmica durante los ciclos VTSA	88
5.7 Operación cíclica y estado estacionario.....	89
5.8 Dimensionamiento del sistema en operación continua.....	92
5.9 Análisis paramétrico de variables operacionales	93
5.10 <i>Trade-off</i> entre criterio de ruptura y capacidad cíclica	96
5.11 Escalamiento	97
5.12 Análisis de costos	102
5.12.1 Inversión de capital (CAPEX).....	103
5.12.2 Costos operativos anuales (OPEX).....	104
5.12.3 Costo de captura y precio de equilibrio	105
5.12.4 Análisis de sensibilidad del precio de equilibrio	107
5.12.5 Alcance y limitaciones del análisis económico	108
5.13 Trabajo futuro	109
6. CONCLUSIONES.....	111
REFERENCIAS	112

ANEXOS.....	120
Anexo A: Balances asociados al consumo energético del proceso de adsorción.	121
Anexo B: Ecuación del Balance de Materia Global	122
Anexo C: Balance de Energía en el sólido	124
Anexo D: Balance de Energía en la Fase Gas	126
Anexo E: Modelo dinámico ode15s	127
Anexo F: Estructura modular del modelo.....	129
Anexo G: Inventario de equipos y estimación de indicadores económicos	131
Anexo H: Flujo de caja proyectad al 2045 desde el 2026	134
Anexo I: Análisis de sensibilidad	136

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Principales plantas de captura directa de CO ₂ (DAC) operativas y en desarrollo.	30
Tabla 2: Comparación de materiales adsorbentes aplicados a DAC	37
Tabla 3: Clasificación de ciclos de adsorción sólida	45
Tabla 4: Principales estudios de modelación y simulación de lechos fijos aplicados a DAC	47
Tabla 5: Resumen de parámetros por simular como caso base	65
Tabla 6: Variables del análisis de sensibilidad OAT, rangos de variación y valores de referencia.	73
Tabla 7: Comparación cuantitativa modelo vs. Deschamps et al. (2022)	78
Tabla 8: Comparación entre escala de laboratorio y sistema industrial	100
Tabla 9: Supuestos económicos generales del análisis.....	102
Tabla 10: Desglose CAPEX	103
Tabla 11: Desglose OPEX.....	104
Tabla 12: VAN según precio de venta de CO ₂	106
Tabla 13: Sensibilidad del precio de equilibrio	107
Tabla 14: Comparación de métodos de integración de EDO.....	128
Tabla 15: Inventario de equipos y estimación de CAPEX	131
Tabla 16: Flujo de caja proyectado 2026–2045	134
Tabla 17: Tabla de sensibilidad	136

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Aumento Progresivo de la temperatura y concentración de CO ₂ . Adaptado de Gráfico de la variación con respecto al año 1990 del porcentaje global del CO ₂ en la atmósfera de la Tierra (p. 93), por Machin-Morera et al., 2023.	17
Figura 2: Esquema general del proceso DAC. Se ilustran etapas de captura, regeneración y compresión de CO ₂ . Adaptado de (WRI, 2025)	44
Figura 3: Esquema del volumen de control del lecho fijo DAC-VTSA. El flujo de aire opera en dirección axial ($z = 0 \rightarrow z = L$). Las condiciones de borde cambian según la etapa operacional del ciclo	55
Figura 4: Diagrama de flujo del algoritmo numérico implementado en MATLAB para la simulación del ciclo VTSA. Los criterios de convergencia son $C/C_0 \geq 0.10$ para ruptura y $\Delta X < 0.1\%$ para convergencia cíclica.....	68
Figura 5: Curva de ruptura normalizada y eficiencia de captura de CO ₂ (modelo 1D bajo condiciones ideales: sin degradación ni canalización)	80
Figura 6: Perfiles axiales de concentración de CO ₂ en la fase gas a diferentes tiempos operativos.....	82
Figura 7: Evolución temporal de perfiles de carga adsorbida de CO ₂ a lo largo del lecho fijo.....	84
Figura 8: Co-adsorción CO ₂ /H ₂ O: carga promedio del lecho	85
Figura 9: Distribución espaciotemporal de concentración de CO ₂	87
Figura 10: Temperatura máxima del sólido durante 3 ciclos VTSA.....	88
Figura 11: Evolución de la carga promedio de CO ₂ durante 3 ciclos VTSA completos....	89

Figura 12: Reproducibilidad de la curva de ruptura entre ciclos VTSA consecutivos	90
Figura 13: Panel completo: carga, ruptura, temperatura y eficiencia.....	90
Figura 14: Análisis paramétrico DAC-VTSA. Capacidad cíclica del CO ₂ (ciclos VTSA completos, por lotes cíclico).....	94
Figura 15: <i>Trade-off</i> criterio de ruptura y capacidad cíclica (mayor C/C_0 implica mayor capacidad pero menor pureza del efluente)	96
Figura 16: Diagrama de flujo de proceso (PFD) del sistema de captura directa de CO ₂ mediante adsorción tipo VTSA	101

NOMENCLATURA

Símbolo	Descripción	Unidades
ε_B	Porosidad interparticular del lecho	-
ε_p	Porosidad intraparticular del adsorbente	-
$E a_i$	Energía de activación del componente (i)	kJ/mol
η	Eficiencia de captura	-
r_p	Radio medio de partícula	m
D_p	Diámetro medio de partícula	m
L_b	Longitud del lecho	m
D_b	Diámetro interno del lecho	m
V_b	Volumen total del lecho	m ³
V_g	Volumen de hueco del lecho	m ³
ρ_s	Densidad del sólido adsorbente	kg/m ³
ρ_i	Densidad del compuesto (i) en fase gaseosa	kg/m ³
ρ_g	Densidad de la mezcla gaseosa	kg/m ³
PM_i	Peso molecular del compuesto i	kmol/kg
R	Constante universal de los gases	J/(mol K)
P	Presión del sistema	Pa
T	Temperatura	K
T_g	Temperatura de la fase gaseosa	K
T_s	Temperatura de la fase sólida	K

T_w	Temperatura de pared del lecho	K
U	Coeficiente global de transferencia de calor	W/(m ² K)
h_g	Entalpía específica del gas	J/kg
h_s	Entalpía específica del sólido	J/kg
$C_{\{p,g\}}$	Calor específico del gas a presión constante	J/(kg K)
$C_{\{p,s\}}$	Calor específico del sólido a presión constante	J/(kg K)
C/C_0	Concentración normalizada de salida	-
y_i	Fracción molar del componente (i) en la fase gaseosa	-
C_i	Concentración molar del componente (i) en fase gaseosa	mol/m ³
q_i	Carga adsorbida del componente (i)	mol/kg
q_i^*	Carga de equilibrio del componente (i)	mol/kg
$q_{max,i}$	Capacidad máxima de adsorción del componente (i)	mol/kg
q_m	Capacidad de monocapa (isoterma GAB)	mol/kg
q_{cicl}	Capacidad cíclica operacional	mol/kg
$\Delta H_{ads,i}$	Calor isostérico de adsorción del componente (i)	kJ/mol
h_{gs}	Coeficiente de transferencia de calor gas-sólido	W/(m ² K)
λ_{ax}	Conductividad térmica axial efectiva	W/(m ² K)
$D_{\{ax\}}$	Coeficiente de dispersión axial	m ² /s
$D_{\{m,i\}}$	Difusividad molecular del componente (i) en la fase gaseosa	m ² /s
$D_{\{eff,i\}}$	Difusividad efectiva intraparticular del componente (i)	m ² /s
$D_{\{K,i\}}$	Difusividad de Knudsen del componente (i)	m ² /s

τ	Tortuosidad del adsorbente	-
$k_{\{LDF,i\}}$	Coefficiente cinético del modelo Linear Driving Force para el componente (i)	1/s
u_g	Velocidad superficial del gas	m/s
μ_g	Viscosidad dinámica del gas	Pa s
Re	Número de Reynolds	-
Sh	Número de Sherwood	-
Pe	Número de Péclet	-
Ψ	Esfericidad de la partícula	-
a_w	Actividad del agua	-
HR	Humedad relativa del gas	%
J_i	Flujo de transferencia de masa del componente (i)	mol/(m ³ s)
b_0	Constante de afinidad de referencia (isoterma de Toth)	1/Pa
t_0	Parámetro de heterogeneidad de Toth	-
C_m	Constante de Guggenheim	-
ap	Área superficial específica de partícula	m ² /m ³
Atrans	Área transversal del lecho	m ²
A_i	Parámetro A de la ecuación de Antoine para el componente (i)	-
B_i	Parámetro B de la ecuación de Antoine para el componente (i)	K
C_i	Parámetro C de la ecuación de Antoine para el componente (i)	K

1. INTRODUCCIÓN

El cambio climático es uno de los mayores desafíos científicos, tecnológicos y sociales de las últimas décadas, en tanto acoge una serie de problemáticas que deterioran la condición climática global. De acuerdo con el Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), la acumulación de Gases de Efecto Invernadero (GEI) en la atmósfera ha generado un desequilibrio energético positivo que ha estimulado el incremento progresivo de la temperatura. Dicha situación se ha evidenciado desde la mitad del siglo pasado, en el que se ha incrementado la temperatura promedio a nivel mundial con la intensificación del efecto invernadero gracias a la actividad humana (IPCC, 2021; Gutiérrez-Olguín, 2020).

De este modo, el cambio climático tiene un impacto alarmante en la alteración del balance energético del sistema climático, puesto que representa una amenaza directa para los ecosistemas naturales, la estabilidad de los sistemas climáticos regionales y el bienestar humano (Hansen et al., 2010). Aunque esta problemática tiene a múltiples factores asociados, los GEI representan una de las principales causas que más requieren mitigarse para realizar un tratamiento adecuado que reduzca el calentamiento global. En ese sentido, resulta crucial estudiar y evaluar aquellos procedimientos técnicos u operativos que pueden favorecer tanto el tratamiento como el aprovechamiento de los GEI, en búsqueda de alternativas que garanticen un desarrollo sostenible y un mejoramiento de la situación climática.

Sin embargo, resulta imprescindible comprender cómo funciona el cambio climático y cuál es el papel que cumplen los gases de efecto invernadero en el deterioro de la condición climática. En dicho contexto, es necesario analizar el equilibrio energético entre la radiación solar entrante y la radiación infrarroja que es emitida por la tierra hacia el espacio. Esta

interacción entre ambas radiaciones configura un balance que regula la temperatura planetaria, el cual depende de procesos de reflexión, absorción y reemisión de energía en la superficie y en la atmósfera. Para ello, un 30 % de la radiación solar debería ser reflejada por las nubes, los aerosoles y las superficies brillantes; el 20 % tendría que ser absorbida directamente por la atmósfera y el 50 % restante alcanzaría la superficie terrestre, donde se transformaría en calor y luego se reemitiría como radiación infrarroja

No obstante, el balance energético que estaba, aparentemente, estable durante el Holoceno, se ha visto alterado de manera acelerada desde mediados del siglo XX debido al aumento antropogénico de gases con capacidad de absorción infrarroja (von Schuckmann et al., 2023). Las observaciones satelitales del *Earth Radiation Budget Experiment* y del *Clouds and the Earth's Radiant Energy System* (CERES) confirman este incremento de la radiación en la atmósfera terrestre (Loeb et al., 2021), lo que evidencia el desequilibrio energético global.

Para ser más exactos, la radiación térmica emitida por la superficie terrestre no escapa libremente al espacio: una fracción considerable es absorbida por gases como el CO₂, el CH₄ y el vapor de agua, los cuales actúan como una capa parcialmente transparente al calor (MacCracken, 2001). Dichos compuestos reemiten la energía absorbida en todas direcciones que incluye, nuevamente, hacia la superficie. Esto genera un proceso de retroalimentación térmica conocido como efecto invernadero que funciona como un mecanismo para mantener una temperatura promedio en torno a 15 °C en el planeta, condición que es fundamental para la existencia de vida.

Sin embargo, el aumento de las concentraciones atmosféricas de GEI debido a la actividad humana ha intensificado artificialmente este fenómeno, lo que termina alterando el

balance energético del sistema climático (Trenberth & Fasullo, 2009; Zanna et al., 2019). Es decir, el exceso de gases con capacidad de absorción infrarroja tiene un efecto negativo en el proceso de reemisión al provocar una alteración de su funcionamiento natural, lo cual intensifica el efecto invernadero (Mena, 2024).

Entre estos gases, el dióxido de carbono (CO_2) es el más relevante, no por su poder capacidad individual de retención térmica, sino por la magnitud de sus emisiones y su larga permanencia en la atmósfera (Environmental Protection Agency [EPA], 2024). Si bien otros gases poseen una capacidad de retención térmica superior, tales como el metano (CH_4) y el óxido nitroso (N_2O); el CO_2 continúa siendo el principal compuesto del calentamiento global debido a su abundancia y una persistencia centenaria en la atmósfera (EPA, 2024). Además, el impacto comparativo de estos compuestos se evalúa mediante el *Potencial de Calentamiento Global* (GWP100), en el que se asigna al CO_2 el valor base de 1.

Por ejemplo, en un horizonte de 100 años, el CH_4 presenta un GWP ≈ 30 y el $\text{N}_2\text{O} \approx 300$, donde se demuestra su mayor capacidad de absorción de radiación infrarroja pero menor presencia relativa (IPCC, 2023). Por lo anterior, el CO_2 conserva el rol estructural más determinante en tanto participa transversalmente en todos los sectores emisores, desde la generación eléctrica y la industria pesada hasta el transporte y la producción agrícola (IPCC, 2023; Friedlingstein et al., 2023).

De este modo, con el aumento de estos gases y, en especial, del dióxido de carbono, se ha generado un exceso energético que provoca, directamente, el calentamiento del planeta. El exceso de energía acumulada se distribuye entre la atmósfera, los océanos y la criósfera, lo que origina un calentamiento generalizado que desencadena procesos como el retroceso glaciar, la acidificación oceánica y la intensificación del ciclo hidrológico (Li et al., 2020).

Entre estos, el océano se encarga de absorber más del 90 % del exceso de calor planetario, por lo que no solo se ha registrado un incremento térmico histórico en las capas superiores del océano, sino que también evidencia la magnitud del desequilibrio energético (IPCC, 2021; Li et al., 2020). Asimismo, los sistemas oceánicos y atmosféricos desempeñan un papel esencial en la redistribución del calor planetario.

Del mismo modo, el calentamiento global ha provocado una serie de cambios en la Circulación Meridional del Atlántico (AMOC) y en las corrientes superficiales, lo que implica una ralentización en el transporte de energía que pueden alterar los patrones climáticos regionales y la estabilidad del clima global (Caesar et al., 2021). Paralelamente, el ciclo hidrológico se ha intensificado con los años. Los registros muestran un incremento de eventos climáticos extremos, en los que se ha evidenciado una alternancia entre sequías prolongadas y precipitaciones torrenciales, así como una disminución de la nieve estacional y una afectación directa tanto a los sistemas agrícolas como a la seguridad hídrica (Allan et al., 2023).

Estas problemáticas ocasionadas por el cambio climático han conducido al reconocimiento y responsabilización del origen antropogénico del calentamiento global, lo que condujo a la creación de un marco institucional global para enfrentar el problema. El compromiso se estableció en el Acuerdo de París en el año 2015, en el que se pretendía mantener el aumento de la temperatura media global muy por debajo de los 2 °C respecto a los niveles preindustriales, mientras se encaminaban todos los esfuerzos para limitarlo a 1,5 °C (United Nations Framework Convention on Climate Change [UNFCCC], 2015).

Sin embargo, evaluaciones recientes del IPCC y del Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA) indican que los compromisos nacionales actuales no son

suficientes. La responsabilidad del calentamiento global no se ha asumido en su totalidad, lo que ha generado que no se disminuya ni la concentración de CO₂ ni la temperatura global; por el contrario, la emisión de este gas solo ha ido en aumento, como se muestra en la Figura 1. Bajo esta trayectoria de emisiones que siguen vigentes en el planeta, se podría alcanzar aumentos entre 2,4 °C y 2,8 °C hacia el año 2100 (IPCC, 2023; Millar et al., 2017).

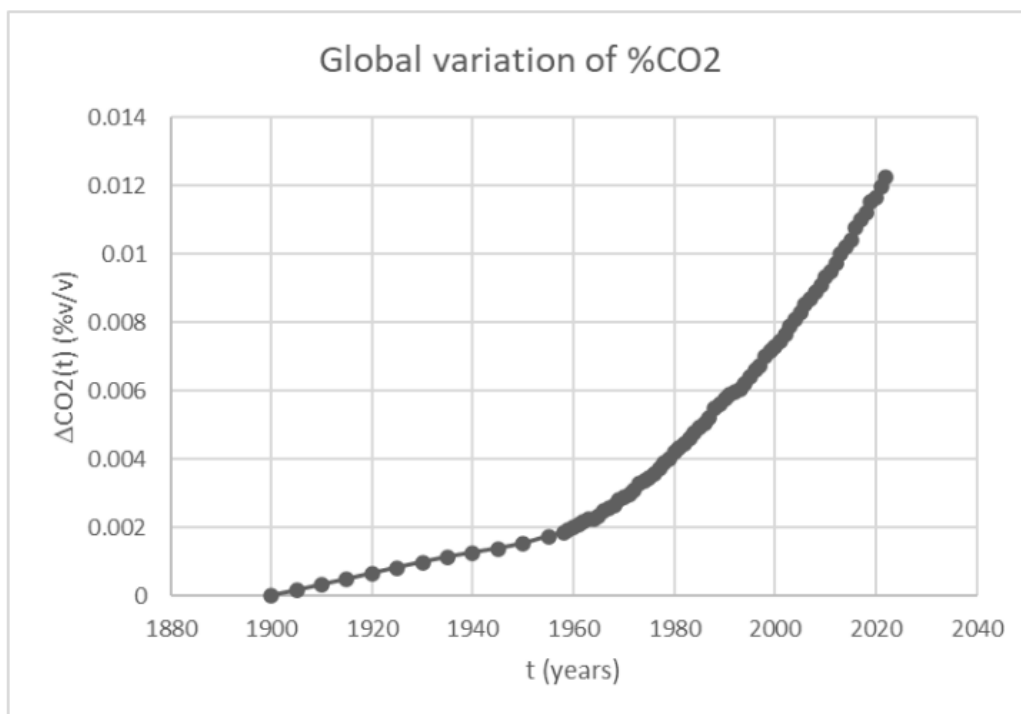


Figura 1: Aumento Progresivo de la temperatura y concentración de CO₂. Adaptado de Gráfico de la variación con respecto al año 1990 del porcentaje global del CO₂ en la atmósfera de la Tierra (p. 93), por Machin-Morera et al., 2023.

En ese orden de ideas, para cumplir con los objetivos climáticos se requiere una acción global sostenida que combine tanto la cooperación de políticas públicas como el financiamiento verde, con lo cual se pueda direccionar los sistemas energéticos hacia una transformación estructural (IEA, 2023). La descarbonización profunda no implica solo la

reducción de las emisiones directas provocadas por el uso de los combustibles fósiles, sino que también demanda el desarrollo de tecnologías que permitan remover el CO₂ que se encuentra por sobre los niveles biogénicos. A través de este método, sería posible compensar las emisiones residuales de sectores que son difíciles de abatir (McQueen et al., 2021).

Con respecto a lo anterior, uno de los principales factores detrás del desequilibrio climático es la existencia de una brecha, persistente, entre las emisiones antropogénicas de CO₂ y la capacidad de absorción de los sumideros naturales. Sectores como la generación termoeléctrica, el transporte, la industria cementera y la agricultura intensiva, no solo representan aproximadamente el 75 % de las emisiones globales de GEI, sino que producen una mayor cantidad de gases de los que puede procesar el planeta (Friedlingstein et al., 2023).

Aunque los océanos y ecosistemas terrestres actúan como sumideros de carbono, en donde se absorbe cerca del 55 % del CO₂ emitido anualmente (26 % por el océano y 29 % por la biosfera), aún queda un 45 % de este gas que permanece en la atmósfera e intensifica el efecto invernadero (Friedlingstein et al., 2023). El CO₂ sigue en aumento en tanto una de las principales fuentes de energía se consolidan en la quema de combustibles fósiles, los cuales también pueden poner en riesgo la salud de las personas (Rengifo, 2022). Esta brecha, lejos de estabilizarse, se amplía con el crecimiento demográfico y la expansión industrial, lo que acentúa la urgencia de implementar tecnologías complementarias a la mitigación convencional.

En este contexto, la Direct Air Capture (DAC) o captura directa del aire surge como una herramienta tecnológica estratégica que se orienta a lograr emisiones netas negativas, a través de la extracción de CO₂ directamente de la atmósfera (Keith et al., 2018). La DAC representa una de las estrategias más avanzadas dentro del conjunto de tecnologías de

remoción de dióxido de carbono, Carbon Dioxide Removal (CDR). A diferencia de los sistemas de captura en fuentes puntuales, como plantas termoeléctricas o procesos industriales, la DAC actúa directamente sobre el aire que se encuentra en el ambiente, lo que permitiendo capturar el CO₂ incluso cuando se encuentra en concentraciones extremadamente bajas (≈ 420 ppm). Esta característica le otorga flexibilidad territorial, en tanto su instalación puede realizarse cerca de fuentes de energía renovable o de sitios adecuados para almacenamiento geológico (Keith et al., 2018; IEA, 2023).

Con respecto a esto, cabe resaltar que el funcionamiento de la DAC se puede clasificar en dos enfoques tecnológicos: procesos con sorbentes líquidos y procesos con adsorbentes sólidos. Por un lado, en el primer enfoque se emplean soluciones alcalinas, tales como NaOH o KOH, para que reaccionen químicamente con el CO₂ y formen carbonatos o bicarbonatos. Posteriormente, el adsorbente se regenera mediante altas temperaturas para liberar el gas concentrado (Keith et al., 2018). Por otro lado, el segundo enfoque, el cual constituye el foco de este trabajo, utiliza materiales sólidos porosos que pueden ser zeolitas, sílicas funcionalizadas con aminas o metal-organic frameworks (MOFs), los cuales tienen la capacidad de adsorber selectivamente CO₂. Dichos materiales pueden operar tanto por interacciones físicas mediante fuerzas de Van der Waals, como por enlaces químicos que producen formaciones reversibles de enlaces amina-carbamato (Abdullatif et al., 2023).

Del mismo modo, el proceso DAC está condicionado por los requerimientos energéticos, tanto térmicos como eléctricos. La energía térmica necesaria para regenerar el sorbente puede oscilar entre 1,5 y 3,5 GJ por tonelada de CO₂ capturado; en cambio, el consumo eléctrico necesario para el movimiento del aire y la compresión del gas puede estar entre 0,5 y 1 MWh por tonelada (Fasihi et al., 2019). Estas demandas energéticas, aunque

son altas, pueden mitigarse integrando fuentes renovables (solar, eólica o geotérmica) que permitan reducir las emisiones indirectas y mejorar el balance neto del proceso (IEA, 2023).

Por ello, ante los requerimientos energéticos, conviene reconocer que el desempeño de estos sistemas depende de una combinación de factores termodinámicos, cinéticos y ambientales. Principalmente, las condiciones climáticas locales concernientes a la temperatura y la humedad relativa influyen directamente tanto en la capacidad de captura de aire, como en la energía requerida para la regeneración del sorbente. El efecto de la humedad depende del tipo de material: en adsorbentes de fisisorción como zeolitas, la baja humedad reduce la competencia por sitios activos; en cambio, en sorbentes amínicos funcionalizados, la presencia de humedad puede favorecer la captura mediante el mecanismo de bicarbonato (Deschamps et al., 2022; Zhu et al., 2022). En contraste, ambientes fríos o húmedos pueden provocar una disminución en la capacidad efectiva de adsorción y un aumento del consumo energético total (McQueen et al., 2021).

En ese sentido, desde el punto de vista económico y operativo, la Captura Directa del Aire enfrenta aún desafíos relevantes vinculados a su costosa inversión de capital vinculada a su gasto energético. Las estimaciones más recientes por la International Energy Agency (IEA) muestran que el uso del DAC tiene costo de captura entre 600 y 1000 USD por tonelada de CO₂, los cuales son valores propios de sistemas comerciales en fase inicial. Sin embargo, de acuerdo Fasihi et al. (2019) y McQueen et al. (2021), la proyección tecnológica sugiere que las mejoras en la eficiencia térmica, la optimización de materiales y las economías de escala podrían reducir esos costos a rangos entre 100 y 300 USD/tCO₂ hacia mediados de siglo. Así, este escenario resulta coherente con la experiencia de otras tecnologías limpias, como la fotovoltaica o la eólica, en las que se ha logrado reducciones exponenciales en los

costos operativos mediante la innovación, el aprendizaje industrial y un apoyo de políticas públicas continuo (Arguello-Pérez, 2022; IEA, 2023).

En el contexto internacional se refuerza esta visión. Especialmente en los mercados de carbono regulados como el *European Union Emissions Trading System (EU ETS)*, quienes han experimentado un incremento en el precio de las emisiones al superar los 80 €/tCO₂ en el 2025 y con una proyección para 2030 por encima de los 150 €/tCO₂ (Mantulet et al., 2023). De esta manera, el alza no solo actúa como incentivo financiero para las tecnologías de captura, sino que también redefinen el valor económico del CO₂ como recurso industrial. A su vez, los mercados voluntarios de carbono muestran un interés creciente por créditos asociados a la captura directa, dada su trazabilidad y permanencia comprobable (IEA, 2023).

En este escenario, la DAC emerge no solo como una herramienta ambiental, sino también como un potencial económico en la transición hacia una economía baja en carbono. Su integración con fuentes de energía renovable y con industrias emergentes, tales como la del hidrógeno verde, amplían su viabilidad técnica y su potencial para generar encadenamientos productivos sostenibles. Particularmente, en regiones áridas como el norte de Chile, la sinergia entre energía solar de alta irradiancia y materiales adsorbentes de bajo consumo hídrico podría permitir sistemas de captura regenerativa autosuficiente, lo que reduciría la dependencia de insumos fósiles y minimizaría el costo nivelado del carbono capturado (Kundu et al., 2024).

En este sentido, el potencial chileno para la implementación de una tecnología como el DAC es notable. Por un lado, el país ha asumido el compromiso de reducir sus emisiones de GEI en un 45 % en el 2030 respecto a los niveles de 2007. Además, con la finalidad de alcanzar la neutralidad del carbono en el 2050, el país reconoce que el sector energético es

una de las principales causas de esta problemática al concentrar aproximadamente el 77 % de las emisiones nacionales (Kundu et al., 2024, p. 9; Gobierno de Chile, 2021).

Chile ofrece condiciones diversas para tecnologías DAC: el Desierto de Atacama, con baja humedad (<20% HR) y alta irradiancia solar, resulta favorable para adsorbentes de fisisorción como zeolitas; mientras que la región de Magallanes, con humedad moderada-alta (70–85% HR) y alta disponibilidad de energía eólica, podría favorecer sorbentes amínicos. Esta diversidad climática constituye una oportunidad para evaluar qué combinación de material y localización maximiza la viabilidad del proceso.

Asimismo, el impulso del país hacia el hidrógeno verde y la descarbonización de su matriz eléctrica abre oportunidades sinérgicas para la valorización del CO₂ capturado. El gas puede emplearse como insumo en la producción de combustibles sintéticos, fertilizantes, metanol u otros productos químicos neutros en carbono (Realmonte et al., 2019). Es entonces que esta integración no solo disminuye el impacto ambiental, sino que también crea valor agregado al transformar el CO₂ desde un residuo a un recurso estratégico.

En el ámbito de la investigación, los sistemas DAC constituyen una alternativa versátil que combina eficiencia, modularidad y capacidad de acoplamiento con energía renovable que está basada en sistemas adsorbentes con sólidos que tiene la capacidad de regenerarse. En ese sentido, su escalabilidad depende del desarrollo de materiales con alta capacidad de capturar el CO₂ a bajas presiones parciales, así como del perfeccionamiento de los ciclos TVSA/VTSA (Temperature/Vacuum Swing Adsorption) y de la optimización de la gestión térmica del sistema. Estudios recientes como el de Sinha et al. (2023) corroboran que una adecuada configuración de estos ciclos puede reducir hasta en un 25% el consumo energético total, lo que indudablemente aumenta la viabilidad del proceso a escala industrial.

Considerando el compromiso de Chile con la neutralidad del carbono, el desarrollo de tecnologías de Captura Directa del Aire se presenta como una oportunidad estratégica y coherente con la política energética nacional. La creciente disponibilidad de energías renovables competitivas y las condiciones climáticas favorables en su zona norte hacen factible una implementación de esta tecnología, la cual no solo permitiría reducir las concentraciones atmosféricas de CO₂, sino que también podría impulsar nuevos sectores industriales basados en la valorización del carbono capturado. Por todo lo anterior, esta investigación se plantea como un aporte técnico-científico al estudio de la viabilidad de la Captura Directa del Aire mediante adsorbentes sólidos en condiciones representativas en Chile.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo general

El objetivo general de esta memoria es evaluar la viabilidad técnica y económica de un sistema de Captura Directa del Aire (DAC) basado en el ciclo *Vacuum Temperature Swing Adsorption* (VTSA) con sorbente amínico, mediante simulación dinámica del proceso a escala laboratorio e industrial.

2.2. Objetivos específicos

Los objetivos específicos de este trabajo corresponden a:

1. Desarrollar e implementar un modelo dinámico unidimensional del proceso de adsorción-regeneración en lecho fijo, que incorpore balances acoplados de masa y energía, isothermas de equilibrio multicomponente CO₂/H₂O, y las ocho etapas del ciclo VTSA, validando su coherencia física mediante análisis de balance de masa y comparación con literatura.
2. Determinar los indicadores operacionales clave del sistema: curva de ruptura, capacidad cíclica, factor de utilización del adsorbente y tiempo de ciclo en estado estacionario, y evaluar mediante análisis paramétrico el efecto de la velocidad superficial, temperatura de entrada, humedad relativa y criterio de ruptura sobre dichos indicadores.
3. Estimar los requerimientos energéticos del proceso a escala industrial y realizar una evaluación económica preliminar que incluya CAPEX, OPEX, costo de captura por tonelada de CO₂ y análisis de sensibilidad, para determinar las condiciones bajo las cuales el proceso es económicamente viable.

3. ESTADO DEL ARTE

Para asumir el reto que supone el cambio climático, la captura directa de CO₂ en el aire se presenta como una opción viable para contribuir y reducir las concentraciones de gases de efecto invernadero en la atmósfera. A través de sistemas de adsorción, esta tecnología es especialmente útil en aquellos escenarios donde las emisiones no se generan en fuentes concentradas, como ocurre en muchos procesos industriales y de transporte (Fasihi et al., 2019; Keith et al., 2018). Esta tecnología resulta particularmente prometedora para el caso de Chile, debido a que las características climáticas del norte del país poseen los niveles necesarios de baja humedad relativa y elevada irradiación solar para que se facilite la integración de este sistema con energías renovables (IEA, 2023).

A nivel teórico, esta oportunidad para aprovechar las condiciones naturales de la región no solo es factible, sino que supone una serie de posibilidades para constituir una implementación eficiente, con recursos renovables y sostenibles. Sin embargo, dicha implementación también requiere del componente práctico, en el que sea posible contemplar y analizar diferentes tipos de experiencias de este sistema, con la finalidad de comprender sus características, funcionamientos y requerimientos.

De esta manera, resulta imprescindible reconocer el estado del arte de esta tecnología, no solo bajo la necesidad de evidenciar cuáles han sido los avances que ha tenido la adsorción aplicada a los sistemas DAC, sino también para ubicar qué progresos e innovaciones se han identificado en los materiales, ciclos operativos y modelaciones que mejoran la implementación del sistema a nivel operativo (Deschamps et al., 2022; Sanz-Pérez et al., 2016). En búsqueda de abordar los desafíos técnicos y económicos que suponen los sistemas DAC, es importante consolidar un enfoque que alinee estas innovaciones con las necesidades

locales y globales de la mitigación climática. A continuación, se expone el panorama internacional y nacional de los sistemas DAC, así como los principales lineamientos teórico-prácticos para la implementación de esta tecnología.

3.1. Panorama global de las tecnologías de captura DAC

A diferencia de otras tecnologías más tradicionales que se centran en fuentes puntuales como plantas industriales, la captura de CO₂ a través de la DAC desempeña un rol complementario al permitir la remoción de emisiones dispersas o históricas en el aire (McQueen et al., 2021). Por ello, integración es un componente esencial para alcanzar la neutralidad de carbono, razón por la que su implementación ha ido en aumento como una herramienta crucial para confrontar el cambio climático. Según la IEA (2023) la capacidad global de DAC ha alcanzado niveles modestos con un crecimiento notable desde el 2024, a través de una distribución con plantas de pequeña escala. De este modo, se espera que la capacidad de los sistemas DAC aumenten significativamente para finales de 2025, impulsados por proyectos en regiones como Estados Unidos, Islandia y Noruega.

A pesar de estos avances, las DAC aún representan una mínima fracción de las emisiones globales, lo que subraya la necesidad de un escalamiento acelerado (Kundu et al., 2024). En contraste, las tecnologías de captura en plantas industriales o en fuentes puntuales han logrado capturar mayores volúmenes de CO₂, aunque su función esté limitada a emisiones concentradas (Bui et al., 2018).

Entre las tecnologías convencionales de captura de CO₂ se encuentran la precombustión, la postcombustión y la oxcombustión. Cada una de estas tecnologías, si bien ofrecen ventajas y beneficios, también se ven limitadas por distintos factores. Por ejemplo,

la precombustión es aplicada en procesos con hidrógeno, por lo que requiere una infraestructura especializada para el manejo de ambos gases en altas presiones; la postcombustión utiliza aminas para capturar CO₂ con alta eficiencia, aunque cuenta con una alta demanda energética para su funcionamiento; así como la oxidación, que ofrece una alta pureza al incrementar los costos operativos debido a la separación de aire (IEA, 2023).

Si bien estas tecnologías son efectivas, su funcionamiento y operación también conllevan limitaciones, requerimientos y gastos energéticos significativos, al igual que el sistema DAC. Por más de que estas fuentes procesen mayores volúmenes de CO₂, solo pueden realizarlo cuando existen concentraciones superiores al 10%, mientras que el DAC aborda concentraciones mucho menores. Aún si este sistema requiere procesar grandes volúmenes de aire, mediante ventiladores de baja presión, su uso está focalizado para procesar el CO₂ que históricamente se concentra en el aire en concentraciones bajas, lo que le permite fungir como un sistema que complementa las limitaciones de las tecnologías convencionales (Deschamps et al., 2022; Keith et al., 2018).

Además, su función no se limita solo a la captura de CO₂, en tanto este gas capturado puede destinarse a múltiples procesos industriales. Por ejemplo, el CO₂ obtenido por este sistema puede utilizarse en el almacenamiento geológico, el cual ha alcanzado niveles significativos en 2025; o en procesos industriales como la producción de combustibles sintéticos o bebidas carbonatadas, mercados con suma relevancia y usos en la industria alimentaria de Chile.

Ahora bien, como se mencionó anteriormente, las tecnologías DAC se dividen en dos categorías principales: sólido y líquido. En el caso de los sistemas basados en adsorbentes sólidos, el desempeño del proceso no solo depende del material utilizado, sino también del

ciclo operacional mediante el cual se lleva a cabo la regeneración del adsorbente. En este contexto, se han desarrollado distintos esquemas que permiten inducir la desorción del CO₂ mediante variaciones de presión, temperatura o suministro energético. Entre ellos, destacan los ciclos *Vacuum Swing Adsorption (VSA)*, en los cuales la reducción de presión favorece la liberación del CO₂ adsorbido; y *Temperature Swing Adsorption (TSA)*, que emplea el aumento de temperatura para lograr el mismo objetivo. Sin embargo, dado que en aplicaciones DAC las concentraciones de CO₂ son extremadamente bajas, estos enfoques presentan limitaciones en términos de eficiencia operativa.

Por esta razón, en el desarrollo reciente de la tecnología se ha priorizado el uso de ciclos híbridos como el *Vacuum Temperature Swing Adsorption (VTSA)*, que combinan simultáneamente la reducción de presión y el incremento de temperatura, permitiendo optimizar el balance entre capacidad de captura y requerimientos energéticos. Este tipo de configuración ha sido ampliamente adoptado en sistemas DAC modernos, particularmente en aquellos que utilizan sorbentes funcionalizados con aminas (Fasihi et al., 2019; McQueen et al., 2021). De forma complementaria, también se han explorado alternativas como el *Electrical Swing Adsorption (ESA)*, basado en calentamiento resistivo directo del adsorbente, aunque su aplicación a gran escala aún se encuentra en desarrollo (Sanz-Pérez et al., 2016).

Aún así, a nivel internacional diversas empresas, líderes en el mercado, han comenzado a utilizar el DAC al integrarlo con energías renovables. Empresas como Climeworks operan plantas en Islandia que combinan adsorción con energía geotérmica (Climeworks, 2025), del mismo modo que 1PointFive, en Texas, que integran la captura líquida con almacenamiento geológico o Heirloom, en California, quienes utilizan ciclos alcalinos. Debido a esto, en los últimos años las políticas internacionales buscan incentivar

el desarrollo de la DAC, como en Estados Unidos o Suiza con la estrategia de captura y utilización de carbono.

El panorama mundial demuestra un incremento significativo en proyectos piloto que validan estas tecnologías, aunque persisten retos asociados o relacionados con costos energéticos y estabilidad a largo plazo. Si bien dichos proyectos enfrentan desafíos sustanciales, como la baja concentración de CO₂, los costos iniciales de infraestructura y la necesidad de integración energética, su auge y constante desarrollo es notorio con la creación de múltiples plantas alrededor del mundo, como se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1: Principales plantas de captura directa de CO₂ (DAC) operativas y en desarrollo

Planta	Compañía	Tecnología	Material	T Regeneración (°C)	Energía (kWh/t)	Recuperación %	Costos (USD/tCO ₂)	Capacidad (kt/año)	Fuente
Mammoth	Climeworks	TVSA	Aminas poliméricas	80-100	1500-2000	>95	600-800	36	IEA (2023); Climeworks (2026)
Orca	Climeworks	TVSA	Aminas poliméricas	80-100	1800-2200	>90	700-900	4	Climeworks (2026)
STRATOS	1PointFive	L-DAC	KOH	900	2000-2500	>99	500-700	500	IEA (2023)
South Texas DAC	Occidental	L-DAC	KOH	900	2200-2800	>98	600-800	100	Occidental (2025)
HIF Chile Pilot	HIF Global	TVSA-Híbrido	Zeolitas/Aminas	100-120	1200-1800	>92	400-600	0.6	HIF Global (2025)
Heirloom	Heirloom	L-DAC	Ca(OH) ₂	>600	2500-3000	>95	500-700	1	Heirloom (2025)
Removr	Removr	S-DAC	Zeolitas	80-120	1500-2000	>90	600-800	2	IEA (2023)

En el panorama nacional, HIF Global ha desarrollado un piloto en Haru Oni que combina adsorción híbrida con energía eólica para producir combustibles sintéticos, en el que se destacan las sinergias con la industria del hidrógeno verde. En ese sentido, en Chile existen las condiciones necesarias para la implementación de este sistema en el desierto de Atacama, en la que la humedad y la abundante radiación solar ofrecen ventajas para reducir costos operativos. Asimismo, la combinación con otras tecnologías, como la bioenergía con captura, podrían aumentar la capacidad global significativamente, por lo que la DAC podría apoyar a industrias como la minera al compensar emisiones y proporcionar CO₂ para procesos específicos.

En definitiva, el panorama mundial muestra que el desarrollo de los sistemas DAC tienen un énfasis creciente en la comprensión de cómo las condiciones ambientales influyen en el rendimiento del proceso y de qué maneras se pueden utilizar energías renovables en la disminución de costos operativos. Esto subraya la importancia de adaptar las soluciones a contextos específicos, tales como el desierto de Atacama, donde la baja humedad minimiza interferencias y potencia la selectividad de los adsorbentes (Shi et al., 2020).

Estudios recientes como el de McQueen et al. (2021) enfatizan la necesidad de integrar distintos enfoques multidisciplinarios, combinando química de materiales con ingeniería de procesos para optimizar la captura y regeneración del CO₂ en sistemas escalables. Por ello, los distintos retos que enfrenta esta tecnología invitan a explorar, implementar y evaluar enfoques híbridos que, a través de simulaciones, permitan construir sistemas más precisos para su aplicación en entornos como el chileno (Viebahn et al., 2019).

3.2. Fundamentos teóricos de la adsorción en la captura de CO₂

Históricamente, la adsorción ha sido estudiada desde finales del siglo XIX, con contribuciones pioneras como la de Langmuir en 1918, aunque su aplicación en sistemas DAC ha ganado impulso en las últimas décadas gracias a los avances en materiales porosos y procesos de regeneración (Sanz-Pérez et al., 2016). En esencia, la adsorción aprovecha las interacciones intermoleculares para retener selectivamente el CO₂ para que, posteriormente, se liberen mediante cambios en temperatura, presión o humedad, lo que facilita ciclos repetitivos y eficientes (Wurzbacher et al., 2012; Zhu et al., 2022).

La adsorción se distingue principalmente en dos tipos: la fisisorción y la quimisorción. Por un lado, en el primer tipo de adsorción se involucran interacciones débiles como fuerzas de Van der Waals o electrostáticas, con energías de enlace entre 20 y 40 kJ/mol, que facilitan la regeneración a temperaturas inferiores a 150 °C y permiten constituir ciclos reversibles con mínima degradación. Por otro lado, la quimisorción se basa en enlaces químicos más fuertes (50 a 100 kJ/mol) que ofrecen una mayor selectividad hacia el CO₂, incluso en presencia de otros gases como el nitrógeno o el vapor de agua, aunque requieren más energía para la desorción (Queijo, 2017).

En el ámbito de la DAC, la fisisorción es predominante en adsorbentes como zeolitas y carbón activado, ideales para entornos con baja concentración de CO₂; en cambio, la quimisorción se emplea en sorbentes funcionalizados con aminas para mejorar la afinidad en condiciones húmedas, como ha demostrado Shi et al. (2020) en revisiones recientes que destacan su estabilidad en ciclos superiores a 10.000 repeticiones. Por ejemplo, con materiales de quimisorción la formación de carbamatos (como en reacciones con aminas primarias: $2\text{RNH}_2 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{RNHCOO}^- + \text{RNH}_3^+$) incrementan la capacidad de captura. Sin

embargo, en dicha formación también se presentan una serie de desafíos como la sensibilidad a la oxidación por el oxígeno atmosférico (21% en el aire), que puede reducir la vida útil del material en un 10-20% anual si no se mitiga con encapsulaciones o purgas inertes (Chen et al., 2025).

En cuanto a la adsorción con sólidos, esta es un proceso superficial en el cual las moléculas de CO₂ se adhieren a un material sólido, lo cual permite que se separen selectivamente de la atmósfera donde la concentración actual de CO₂ ronda las 420 ppm (NOAA, 2025). Por esta razón, el mecanismo de la adsorción en sólidos resulta fundamental en los sistemas DAC, en tanto estos operan bajo condiciones ambientales cercanas a la presión atmosférica con temperaturas moderadas, lo que minimiza el gasto energético en comparación con técnicas de absorción en soluciones líquidas (House et al., 2011).

Ahora bien, para ser más exactos con el proceso de la adsorción resulta imprescindible comprender el equilibrio termodinámico. El equilibrio termodinámico de la adsorción se modela mediante isothermas que relacionan la cantidad adsorbida (q , expresada en mmol/g) con la presión parcial (P) a una temperatura fija. En el modelo de Langmuir, se asume una superficie homogénea y una adsorción en monocapa, la cual se formula como muestra en la Ecuación (1) [Do, 1998]:

$$q = \frac{q_{(max,i)} b_i P}{1 + b_i P} \quad (1)$$

Donde, q_m representa la capacidad máxima de adsorción y b la constante de afinidad, la cual varía entre 10^3 y 10^4 bar⁻¹ para CO₂ a temperaturas ambientales. Sin embargo, para

superficies heterogéneas, que son comunes en materiales reales, el modelo de Toth proporciona una mejor aproximación al incorporar un parámetro de heterogeneidad (t , usualmente entre 0.5 y 1), como se muestra en la Ecuación (2) [Do, 1998]:

$$q = \frac{q_{max,i} b_i P}{[1 + (b_i p_i)^{t_0}]^{\frac{1}{t_0}}} \quad (2)$$

Este modelo es particularmente útil en el DAC, donde las presiones parciales son extremadamente bajas (alrededor de 0.0004 bar), lo que permite realizar predicciones precisas de la capacidad en concentraciones diluidas. Para el vapor de agua, un competidor y aspecto muy relevante en la adsorción, se utiliza el modelo de Guggenheim-Anderson-de Boer (GAB) (Sriram et al., 2025) que describe la adsorción multicapa, como se muestra en la Ecuación (3) [Do, 1998]:

$$q = \frac{q_{(m)} C_m K_{GAB} a_w}{(1 - K_{(H_2O)} a_w)(1 - K_{(H_2O)} a_w + C_{H_2O} K_{(H_2O)} a_w)} \quad (3)$$

Donde, a_w es la actividad del agua y los parámetros M , C y K cuantifican la interacción en la primera capa y subsiguientes. Esto ayuda a evaluar la selectividad CO_2/H_2O que puede caer por debajo de 10 en ambientes húmedos, lo que reduce la eficiencia hasta en un 50% si la humedad relativa supera el 40%. Estudios experimentales han mostrado que la co-adsorción de agua puede incluso mejorar la cinética en ciertos rangos de HR (20-40%) con sorbentes como aminas funcionalizadas, lo que actúa como un catalizador en la

formación de bicarbonatos, aunque esto depende en gran medida del tipo de amina y la temperatura operativa.

Desde el punto de vista cinético, la adsorción involucra distintos procesos de difusión, a saber: difusión molecular, difusión de Knudsen y difusión superficial. Por ejemplo, la difusión molecular involucra difusividades alrededor de 10^{-5} m²/s y la Knudsen sucede en microporos menores a 2 nm. Estas se modelan frecuentemente con la aproximación de Linear Driving Force (LDF), visualizado en la Ecuación (4) [Do, 1998]:

$$\frac{dq_i}{dt} = k_{(LDF,i)}(q_i^* - q_i) \quad (4)$$

Donde k oscila entre 0.1 y 1 s⁻¹ dependiendo del tamaño de la partícula. Asimismo, las propiedades del adsorbente son temas críticos para el rendimiento operativo, por lo que se caracteriza aspectos como: el área superficial medida por BET (superior a 1000 m²/g en carbón activado y hasta 7000 m²/g en MOFs); la distribución de poros (microporos para retención selectiva de CO₂ de 0.33 nm, mesoporos para transporte rápido y macroporos como canales de acceso), y la estabilidad térmica (superior a 300 °C en zeolitas).

En DAC, se prioriza una capacidad de trabajo ($\Delta q = q_{ads} - q_{des}$) de 1-3 mmol/g y un consumo energético inferior a 2000 kJ/kg de CO₂ para asegurar la viabilidad económica y ambiental (Fasihi et al., 2019). Además, factores como la tortuosidad ($\tau > 1$) y la funcionalización superficial influyen en la selectividad que debe superar 100 para CO₂/N₂ en aplicaciones práctica, por ejemplo, en grupos -NH₂ para mejorar la interacción cuadrupolar con CO₂. Adicionalmente, el proceso de adsorción es exotérmico lo que libera entre 30 y 50 kJ/mol de CO₂ y genera calor que debe gestionarse mediante sistemas de recuperación

térmica, como intercambiadores de calor. Esto último es esencial para optimizar la eficiencia global, dado que se tiene que reutilizar hasta el 70% de la energía liberada.

La relación entre humedad y desempeño depende del material adsorbente: mientras que para zeolitas la baja humedad del norte de Chile minimiza la competencia con el agua, para sorbentes amínicos humedades moderadas (40–80% HR) pueden mejorar la capacidad de captura. Esto amplía el rango de zonas geográficas potencialmente favorables para sistemas DAC en Chile. Estudios recientes como el de Sriram et al. (2025) en el dataset Open DAC 2025, han expandido la comprensión de estos fundamentos al incorporar datos de miles de sorbentes, lo que facilita el diseño computacional de materiales optimizados para condiciones específicas. Por instancia, simulaciones DFT (Density Functional Theory) han revelado que la densidad de sitios activos en microporos puede duplicar la capacidad de trabajo en entornos diluidos.

3.3. Materiales adsorbentes para DAC

Para el funcionamiento de la DAC se identifican cinco clases principales de materiales: carbón activado, zeolitas, metal-orgánicos frameworks (MOFs), sorbentes funcionalizados e hidróxidos metálicos, cada uno con características específicas que determinan su idoneidad según el contexto operativo (Wang et al., 2025). La selección de un material depende de su capacidad de captura, estabilidad a largo plazo y compatibilidad con fuentes de energía renovable. En ese sentido, resulta pertinente reconocer cuales son las principales características de cada uno, como se muestra en la Tabla 2.

Tabla 2: Comparación de materiales adsorbentes aplicados a DAC

Material	Capacidad (mmol/gCO ₂)	Δq (mmol/g)	Selectividad CO ₂ /N ₂	Costo (USD/kg)	Ciclos	Sensibilidad HR	Energía Reg. Del CO ₂ capturado (kJ/mol)	Fuente
Carbón Activado	1-2	0.8-1.2	~10	<1	>5000	Alta (>50% pérdida)	30-40	Shi et al. (2020)
Zeolita 13X	2-4	1.5-2.5	>100	5-10	>10000	Media (30% pérdida)	40-50	Wang et al. (2025)
MOF UiO- 66	4-6	2-4	>200	5000- 15000	>5000	Baja con mod.	50-60	Sriram et al. (2025)
Aminas PEI	3-6	2-3	>50	1-2	>8000	Favorable (efecto cooperativo)	60-80	Shi et al. (2020)
Ca(OH) ₂	3-5	1.5-2.5	Alta	Bajo	>15000	Media	>100	WRI (2025)

En primer lugar, el carbón activado se destaca por ser económicos y poseer áreas superficiales amplias. Como son producidos a partir de biomasa como cáscaras de coco, su uso es adecuado para aplicaciones iniciales. Sin embargo, su sensibilidad a la humedad limita su eficacia en entornos no áridos, ya que el vapor de agua compite por los sitios de adsorción (Shi et al., 2020). En regiones áridas, su bajo costo y estabilidad térmica los convierten en una opción viable para pretratamiento o sistemas híbridos.

En segundo lugar, las zeolitas destacan por su alta selectividad gracias a su estructura porosa y uniforme, así como a la presencia de cationes que favorecen la interacción con el CO₂, en especial las zeolitas de tipo 13X y 5A. Son ideales para procesos de adsorción sólida gracias a su estabilidad en ciclos prolongados (>10.000 ciclos) y a la posibilidad de regeneración a temperaturas moderadas de 100–200°C. Su principal limitación es la sensibilidad a la humedad: la co-adsorción de H₂O reduce la capacidad de CO₂ en aproximadamente un 30% a humedades moderadas (Wang et al., 2025; Wurzbacher et al., 2012). De acuerdo con Wang et al. (2025), algunas modificaciones recientes a este material han mejorado su capacidad, lo que ha permitido que superen al carbón activado en términos de eficiencia energética. En Chile, el acceso a zeolitas locales puede reducir los costos de inversión inicial, fortaleciendo la viabilidad económica.

En tercer lugar, los MOFs ofrecen capacidades de captura superiores debido a su porosidad ajustable y sitios metálicos específicos, como el UiO-66. Avances recientes como el de Sriram et al. (2025) han mejorado su resistencia a la humedad y extendido su vida útil, aunque sus elevados costos aún limitan su aplicación a proyectos piloto o nichos que requieren alta pureza. En comparación, y cuarto lugar, los sorbentes con aminas funcionalizadas destacan por su rendimiento en condiciones húmedas (Sriram et al., 2025).

La presencia de agua no solo no penaliza la captura, sino que la favorece mediante la formación de bicarbonatos, incrementando la eficiencia estequiométrica de la adsorción (Deschamps et al., 2022). Este efecto cooperativo distingue a las aminas de los demás materiales y tiene implicancias directas en la selección de emplazamiento del sistema.

El sorbente amínico empleado en este trabajo corresponde al material APDES-NFC, desarrollado por Gebald et al. (2011) en ETH Zürich. Se obtiene mediante la funcionalización covalente de nanofibras de celulosa (NFC) con 3-aminopropilmetildietoxisilano (APDES), un aminosilano primario, a través de una síntesis en suspensión acuosa sin solventes orgánicos seguida de liofilización. Las nanofibras de celulosa tienen diámetros de 20–60 nm y longitud de varios micrómetros, lo que confiere al material un área superficial específica elevada y, por tanto, alta densidad de sitios amino (~ 3.40 mmol N/g). La presencia de grupos amino primarios ($-NH_2$) determina dos rutas de reacción con el CO_2 : en condiciones secas se forman carbamatos, consumiendo dos grupos amino por molécula capturada; en presencia de humedad moderada se forman bicarbonatos, consumiendo solo uno. Esta segunda ruta explica el efecto cooperativo de la humedad descrito en la sección 3.4 y fundamenta la HR óptima de 60% identificada en el análisis paramétrico (Gebald et al., 2011; Wurzbacher et al., 2012). Aunque enfrentan desafíos relacionados con la degradación por oxígeno, su ventaja resulta gracias a su comportamiento frente a la humedad y a la formación de enlaces químicos con el CO_2 , (Shi et al., 2020).

Por último, los hidróxidos metálicos funcionan mediante ciclos alcalinos que forman carbonatos estables, como el $Ca(OH)_2$. Por ello, se destacan por su alta compatibilidad con energía solar concentrada para la regeneración. Aunque requieren temperaturas altas, su estabilidad los hace atractivos para aplicaciones a gran escala (WRI, 2025).

En términos comparativos, la selección del material determina no solo la capacidad de captura sino también el comportamiento esperado del sistema ante las condiciones climáticas del emplazamiento. Para condiciones húmedas como las de Magallanes (HR 70–85%), el APDES-NFC es el material más adecuado porque convierte la humedad en ventaja mediante el mecanismo de bicarbonato. Una zeolita 13X en ese mismo emplazamiento exhibiría menor capacidad cíclica por co-adsorción competitiva de H₂O, requeriría pretratamiento del aire para secar la corriente de entrada, y aunque su consumo energético de regeneración sería menor (~6–8 GJ/tCO₂ vs ~14 GJ/tCO₂ para APDES-NFC), el costo operacional del pretratamiento y la penalización en capacidad reducirían su competitividad. El carbón activado presenta sensibilidad a la humedad similar a la zeolita pero con menor capacidad cíclica (0.8–1.2 mmol/g), lo que lo descarta como material principal en condiciones húmedas. Los MOFs ofrecen capacidades superiores (4–6 mmol/g) pero sus costos actuales (USD 5.000–15.000/kg) hacen inviable su uso a escala piloto. En condiciones áridas como el Desierto de Atacama (HR < 20%), la jerarquía se invierte: la zeolita 13X operaría cerca de su capacidad máxima sin penalización por humedad, con menor requerimiento energético de regeneración, mientras que el APDES-NFC perdería parte de la ventaja del mecanismo de bicarbonato al operar predominantemente por la ruta de carbamato. Esta dependencia del desempeño relativo respecto al emplazamiento subraya la necesidad de una evaluación comparativa cuantitativa por zona climática como extensión de este trabajo.

Respecto a la disponibilidad del material, la CNF base tiene producción comercial establecida a escala global, con fabricantes como Stora Enso (Finlandia) y Performance BioFilaments (Canadá), y costos de producción reportados de USD 0.89–1.43/kg a plena escala industrial (Clauser et al., 2021). Sin embargo, el sorbente funcionalizado APDES-NFC

no tiene comercialización industrial masiva: es producido internamente por Climeworks y grupos académicos, sin proveedor externo establecido. Para Chile, esto implica que una implementación a escala piloto requeriría importación del material funcionalizado o desarrollo de capacidad de síntesis local, lo que constituye una limitación operacional no resuelta en el presente estudio y que debe considerarse al interpretar los resultados de viabilidad preliminar.

3.4. Efecto de las Condiciones Ambientales

Las condiciones ambientales locales influyen directamente en el desempeño de los sistemas DAC, dado que tanto la humedad relativa como la temperatura afectan la termodinámica y la cinética de la adsorción. Sin embargo, la dirección de este efecto depende fuertemente del tipo de material adsorbente empleado, lo que hace imposible generalizar una condición climática como universalmente favorable para toda tecnología DAC.

Respecto a la humedad relativa, el efecto sobre la captura de CO₂ varía según el mecanismo de adsorción del material. En adsorbentes basados en fisisorción, como zeolitas y carbón activado, el vapor de agua compite directamente por los sitios activos, reduciendo la capacidad de captura de CO₂. Para estos materiales, ambientes con baja humedad relativa (HR < 20%) resultan ventajosos, ya que minimizan la interferencia del agua y permiten ciclos de captura más largos sin pretratamiento del aire (Shi et al., 2020; Wang et al., 2025). En contraste, los sorbentes funcionalizados con aminas presentan un comportamiento diferente: la presencia de agua favorece la formación de especies bicarbonato ($\text{R-NH}_2 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{R-NH}_3^+ + \text{HCO}_3^-$), una ruta que requiere solo un grupo amina por molécula de

CO₂ capturada, frente a la ruta de carbamato en condiciones secas que requiere dos grupos amina. Este efecto cooperativo ha sido documentado en múltiples estudios (Deschamps et al., 2022; Sanz- Pérez et al., 2016; Wurzbacher et al., 2012) y resulta en un máximo de capacidad de captura a humedades del orden de 40–80% HR, dependiendo del material y la temperatura.

Este comportamiento diferenciado tiene implicancias directas para la selección de emplazamiento de sistemas DAC. Zonas con baja humedad, como el Desierto de Atacama, favorecen adsorbentes de fisisorción (zeolitas, carbón activado); en cambio, zonas con humedad moderada-alta, como la región de Magallanes, podrían resultar más favorables para sorbentes amínicos. Esta relación entre material y localización constituye un aspecto frecuentemente omitido en la literatura y un factor crítico en la evaluación de viabilidad de proyectos DAC en contextos específicos.

Respecto a la temperatura, el efecto es más uniforme entre materiales: la adsorción de CO₂ es un proceso exotérmico, por lo que temperaturas más bajas favorecen el equilibrio de adsorción, incrementando la carga del sorbente. Sin embargo, temperaturas muy bajas también pueden aumentar la co-adsorción de H₂O en sorbentes amínicos, generando un trade-off entre capacidad de CO₂ y penalidad energética de regeneración del agua. Temperaturas moderadas (15–25°C) representan un rango operacional razonable para la mayoría de los materiales (McQueen et al., 2021).

3.5. Tecnologías de Adsorción Sólida en DAC

Los ciclos de adsorción sólida han evolucionado hacia sistemas híbridos que combinan cambios térmicos y de presión. Esto permite optimizar tanto la captura como el proceso de regeneración del CO₂. Dichos ciclos ofrecen una serie de ventajas significativas: operación continua, bajo consumo de agua y adaptabilidad a fuentes renovables; sin embargo, enfrentan desafíos relacionados con la degradación de materiales y la escalabilidad (Shi et al., 2020). Entre los avances recientes se destacan los sistemas que utilizan calentamiento eléctrico directo, lo cual reduce los tiempos de regeneración.

En los sistemas basados en adsorbentes sólidos, el proceso de captura directa comienza con la impulsión forzada de aire a través de un lecho adsorbente. Debido a que el CO₂ se encuentra altamente diluido, la tasa de transferencia de masa es baja y requiere tanto grandes caudales de aire como un diseño aerodinámico y eficiente.

En la etapa de adsorción, el aire atraviesa el lecho y el CO₂ es retenido en los poros del material. Una vez se alcanza la saturación del mismo, se inicia la etapa de regeneración o desorción, la cual consiste en liberar el gas capturado mediante el suministro de energía térmica o la aplicación de vacío. Finalmente, el CO₂ se comprime y almacena en forma presurizada para su reutilización industrial o su inyección en formaciones geológicas (Realmonte et al., 2019). A continuación, en la Figura 2 se muestra el proceso de la tecnología DAC por adsorbentes sólidos.

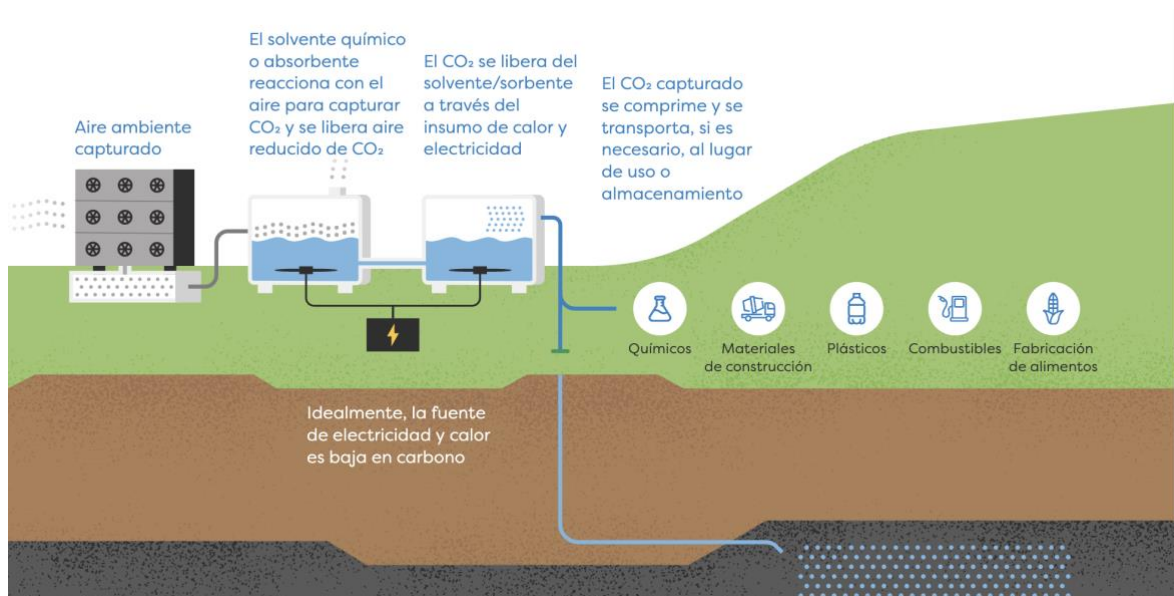


Figura 2: Esquema general del proceso DAC. Se ilustran etapas de captura, regeneración y compresión de CO_2 . Adaptado de (WRI, 2025)

En Chile, el proyecto piloto de HIF Global en Magallanes integra adsorción con energía eólica, lo que permite aprovechar los altos vientos para reducir costos operativos. De este modo, los lechos rotatorios, que dividen el proceso en etapas de adsorción y regeneración, tienen un flujo continuo que mejora la productividad (Climeworks, 2026). Por ello, materiales avanzados incrementan la eficiencia del proceso, como los cerámicos porosos, a pesar de que requieren un manejo cuidadoso de los gradientes térmicos. En este sentido, los ciclos más adecuados dependen de los materiales utilizado, entre los que se destacan los sistemas híbridos que muestran un potencial significativo para aplicaciones industriales. Por lo tanto, estas tecnologías representan un paso clave hacia la implementación a gran escala de la DAC en contextos como el chileno. A continuación, se presenta la Tabla 3, en donde se evidencia la diferencia entre los ciclos de adsorción.

Tabla 3: Clasificación de ciclos de adsorción sólida

Ciclo	Energía (kWh/t)	Pureza (%)	Tiempo Ciclo (h)	Aplicación	Fuente
TSA	1000-1500	>90	2-4	Zeolitas	Shi et al. (2020)
TVSA	1200-1800	>95	1-2	Aminas	Shi et al. (2020)
VTSA	1500-2000	>95	1-3	Híbridos	Wang et al. (2025)
ESA	1000-1400	>92	<1	Avanzado	RSC Advances (2025)

De los ciclos descritos, el VTSA fue seleccionado para este estudio porque combina dos mecanismos de regeneración complementarios: la desorción térmica (TSA), que aporta la energía necesaria para romper los enlaces amina-CO₂, y el vacío (VSA), que reduce la presión parcial de CO₂ favoreciendo termodinámicamente la desorción. Esta combinación permite operar a temperaturas moderadas (110°C) compatibles con la estabilidad del sorbente amínico. El TSA puro requeriría temperaturas superiores a 120–130°C, rango en el que los grupos amina sufren reacciones de ciclación que forman urea, compuesto estable que ocupa los sitios activos de forma irreversible y reduce la capacidad de captura en ciclos sucesivos (Wurzbacher et al., 2012). El VSA puro, por su parte, demanda presiones de vacío más profundas (<100 mbar) con mayor consumo eléctrico específico. La combinación VTSA evita ambas penalizaciones operando a 300 mbar y 110°C, condiciones adoptadas directamente de Deschamps et al. (2022) como referencia de validación (Deschamps et al., 2022; Wurzbacher et al., 2012).

3.6. Modelación y simulación de tecnologías DAC

La modelación del comportamiento dinámico de lechos de adsorción para la DAC ha evolucionado hacia formulaciones unidimensionales que consideran dispersión axial, acoplamiento entre las fases gaseosas y sólidas, así como consideraciones en las caídas de presión. En este contexto, resulta relevante revisar trabajos que han integrado isothermas como Toth para el CO₂, modelos de coadsorción de humedad (H₂O) y estrategias numéricas robustas, tales como el método de líneas con esquemas de diferencias finitas o condiciones de borde tipo Danckwerts (Ruthven, 1984).

Para un lecho fijo, el modelo 1D completo incluye balances de masa en fase gas para cada componente k (CO₂, H₂O, N₂, O₂), con términos de convección, dispersión axial y fuente de transferencia gas-sólido. En este modelo, la cinética se modela con LDF o difusión porosa, mientras que el equilibrio se hace con Toth/GAB. Para la energía se consideran balances en gas y sólido con términos de ΔH_{ads} y acople convectivo. No obstante, cabe destacar que para el momentum se utilizan ecuaciones como la de Ergun para calcular caída de presión y para las condiciones bordes se incluyen Danckwerts en entrada (convección-dispersión equilibrada) y gradiente nulo en salida.

De este modo, las iniciales por etapa son adsorción con lecho limpio, desorción con T elevada y P reducida. Así como la discretización es con el método de líneas con upwind para convección, centrado segundo orden para dispersión; integrador ode15s para rigidez. A continuación, en la Tabla 4 se muestran los principales estudios de simulación y modelación de DAC

Tabla 4: Principales estudios de modelación y simulación de lechos fijos aplicados a DAC

Autor(es), año	Adsorbente material /	Estrategia coadsorción de humedad /	Principales aportes técnicos o hallazgos
Wurzbacher et al. (2012)	Celulosa nanofibrilada funcionalizada con aminas	Co-adsorción de H ₂ O favorece capacidad de CO ₂	Demostración experimental de incremento en captura por humedad; desorción a temperaturas moderadas con pureza alta
Wurzbacher et al. (2012)	Material amina funcionalizada	Modelo no explícito de coadsorción	Modelo transiente de transferencia de calor y masa en desorción TVS
Stampi-Bombelli et al. (2020)	Material amina funcionalizada	Modelo explícito de coadsorción CO ₂ –H ₂ O (modificación de Toth)	Dos ciclos TVSA con estudio paramétrico de energía vs. rendimiento
Deschamps et al. (2022)	Adsorbente amina funcionalizada	Asume coadsorción implícita según modelo base	Modelación detallada TVSA/VTSA en Aspen con validación experimental
Schellevis et al. (2021)	Lecho fijo genérico / DAC	No se enfoca explícitamente en humedad	Modelo 1D dinámico para desempeño y optimización
Balasubramaniam et al. (2024)	Varios sorbentes sólidos para DAC	Exploración de coadsorción y sensibilidad	Evaluación energética y desempeño en TVSA optimizados

Estos trabajos destacan la importancia de integrar coadsorción en modelos dinámicos para DAC. Sus hallazgos proporcionan bases fundamentales para desarrollar simulaciones en las que se consideren condiciones locales chilenas que permitan mejorar la precisión y aplicabilidad del sistema. Para una revisión más completa de estos trabajos relacionados, en el Anexo A se incluye una tabla ampliada que recopila estudios e investigaciones adicionales de la literatura disponible, inspirada en revisiones como la de Shafeeyan et al. (2014), que analiza modelos de transferencia de masa, equilibrio y balances en columnas fijas para CO₂.

3.7 Brechas

La revisión de la literatura en captura directa de CO₂ mediante adsorción sólida permite identificar tres brechas metodológicas relevantes que motivan el presente estudio.

En primer lugar, la mayoría de los estudios de simulación disponibles evalúan el desempeño de los sistemas DAC bajo condiciones genéricas o promedio, sin incorporar de manera explícita la influencia de las condiciones climáticas locales sobre los indicadores operacionales del ciclo. Si bien parámetros como la eficiencia de captura, el consumo energético y la capacidad cíclica son frecuentemente analizados, estos suelen evaluarse de forma aislada, sin una articulación que permita determinar cuándo un sistema puede considerarse técnica y operativamente viable en un contexto territorial específico. Esta fragmentación dificulta la comparación directa entre configuraciones y limita la extrapolación de resultados hacia escenarios concretos (Fasihi et al., 2019; McQueen et al., 2021).

En segundo lugar, como se discutió en la sección 3.4, el efecto de la humedad relativa sobre la capacidad de captura depende del tipo de material adsorbente. Los sorbentes de fisisorción se benefician de ambientes secos, mientras que los sorbentes amínicos pueden beneficiarse de humedades moderadas a altas por el mecanismo de bicarbonato. Sin embargo, la literatura no ofrece evaluaciones comparativas que confronten el desempeño de distintos materiales bajo condiciones climáticas representativas de zonas específicas. En el caso de Chile, esto resulta particularmente relevante: mientras el Desierto de Atacama (HR < 20%, T > 25°C) podría favorecer zeolitas, la región de Magallanes (HR 70–85%, T 5–12°C, alta disponibilidad de energía eólica) podría favorecer sorbentes amínicos. El proyecto piloto de HIF Global en Magallanes opera precisamente en estas condiciones, lo que subraya

la necesidad de una evaluación cuantitativa que permita comparar el desempeño esperado en distintas zonas del país (Chen et al., 2025; Deschamps et al., 2022; Wurzbacher et al., 2012).

En tercer lugar, desde el punto de vista metodológico, la noción de viabilidad rara vez se traduce en indicadores integrados que combinen desempeño técnico, requerimientos energéticos, restricciones operativas y estimación de costos dentro de un mismo modelo. La ausencia de criterios comparativos explícitos y de umbrales de referencia limita la capacidad de los modelos para sustentar conclusiones robustas respecto al potencial real de implementación de estas tecnologías (Deschamps et al., 2022; Wurzbacher et al., 2012).

En consecuencia, se identifica la necesidad de desarrollar un modelo de simulación que, manteniendo el rigor físico y matemático de los modelos dinámicos de adsorción, permita evaluar la viabilidad técnica y económica de un sistema DAC-VTSA con sorbente amínico, desde la escala de laboratorio hasta el dimensionamiento de una planta piloto, incluyendo análisis paramétrico de las variables climáticas relevantes y una estimación de costos derivada directamente de los resultados de simulación.

4. METODOLOGÍA

4.1. Diseño de la simulación

El presente trabajo se sustentó en el desarrollo e implementación de un modelo numérico dinámico, el cual estuvo orientado a representar el comportamiento cíclico de un proceso de Captura Directa de CO₂ desde aire ambiente, a través un proceso de adsorción con oscilación simultánea de vacío y temperatura, VTSA. El objetivo central de esta etapa metodológica fue reproducir de manera consistente los fenómenos de transferencia de masa

y energía que gobiernan tanto la adsorción como la regeneración del sorbente sólido amina funcionalizada sobre celulosa nanofibrada. De este modo, la simulación se consolidó bajo condiciones representativas que se muestran en la Tabla 5 de la sección 4.1.3, de operación en climas húmedos con énfasis en la respuesta transitoria del lecho a lo largo de ciclos completos de operación.

El sistema físico modelado correspondió a una columna de lecho fijo, cilíndrica y rellena con partículas del sorbente APDES-NFC (3-aminopropilmetildietoxisilano injertado sobre celulosa nanofibrada, denominación APDES-NFC-FD según Wurzbacher et al., 2015), cuyas isothermas de equilibrio y parámetros cinéticos se tomaron de Deschamps et al. (2022) (Ver Figura 3), a través de la cual circula el aire ambiente con concentraciones diluidas de CO₂ y vapor de agua. Dicho modelo se formuló bajo un enfoque de primer orden, el cual se sustentó con balances acoplados de masa, energía y momentum, así como con resolución espacio-temporal explícita a lo largo del eje axial del lecho. Por lo tanto, se asumió un comportamiento unidimensional del flujo con régimen transitorio, gas ideal y propiedades constantes del sólido dentro del rango operacional considerado, cuyas hipótesis permiten capturar los fenómenos dominantes del proceso sin introducir complejidades numéricas.

La formulación del modelo se inspiró en configuraciones experimentales que han sido reportadas en la literatura (Deschamps et al., 2022) para procesos DAC-VTSA. Se tomaron en cuenta, particularmente, trabajos desarrollados a escala de laboratorio, aunque en la simulación se adaptaron las configuraciones para que respondieran a las condiciones ambientales y operacionales características de entornos áridos. Dicha adaptación no se limitó a un cambio de condiciones de entrada, sino que también se integró en la lógica del ciclo

VTSA simulado para que permitiera el análisis de la interacción entre temperatura, presión, humedad y cinética de adsorción.

Por lo tanto, el lecho adsorbente se caracterizó mediante parámetros geométricos y físicos, definidos explícitamente en el modelo. Dentro de estos, se incluyeron aspectos esenciales como longitud, diámetro, porosidad interparticular, densidad aparente y tamaño de partícula. Dichos valores se seleccionaron a modo de reproducir condiciones comparables a los estudios que se tomaron como referencia, con la finalidad de poder asegurar que sean físicamente consistentes tanto los procesos de cinética de adsorción como la respuesta térmica del sistema. En ese sentido, la fase gaseosa se considera compuesta por CO_2 , H_2O , N_2 y O_2 , en las que solo se trató el CO_2 y el vapor de agua como especies adsorbibles, mientras que los componentes mayoritarios del aire actuaron como gases portadores inertes.

Por lo tanto, el comportamiento dinámico del sistema se describió mediante ecuaciones diferenciales parciales. De este modo, fue posible representar tanto los balances de masa para las especies adsorbibles en la fase gaseosa y sólida, como los balances de energía para el gas y el sólido, lo que incorporó explícitamente los efectos térmicos asociados a la adsorción exotérmica del CO_2 . La transferencia de masa entre la fase gaseosa y el sorbente se modeló mediante un enfoque de fuerza impulsora lineal, Linear Driving Force (LDF), con la cual fue posible representar, de manera efectiva, la cinética intraparticular sin resolver explícitamente gradientes radiales dentro de las partículas.

Por otro lado, la caída de presión a lo largo del lecho se incorporó mediante la ecuación de Ergun (Ver Anexo A). Con ello, se pudo estimar las pérdidas de carga y su impacto indirecto sobre el consumo energético del proceso, particularmente, durante las etapas de evacuación y purga bajo vacío. Por último, el ciclo VTSA se representó como una

secuencia de etapas operacionales en las que se incluyó: adsorción a presión cercana a la atmosférica, calentamiento del lecho, desorción bajo vacío y enfriamiento previo a la siguiente adsorción. Cada etapa se implementó con condiciones de frontera y parámetros operacionales específicos, para poder obtener la evolución continua de las variables de estado sin introducir discontinuidades artificiales.

Por consiguiente, a través de esta formulación metodológica fue posible disponer de un marco numérico robusto para analizar la captura directa de CO₂ bajo condiciones realistas de operación. De este modo, se logró mantener una coherencia entre los principios físicos del proceso VTSA y su implementación computacional. Así, el modelo desarrollado constituye la base para que se puedan abordar, en las secciones siguientes del capítulo de metodología, las etapas posteriores de implementación numérica, validación conceptual y análisis paramétrico.

4.1.1. Formulación de balances acoplados

El comportamiento dinámico del proceso VTSA se describió mediante un conjunto de balances acoplados de masa, energía y momentum, los cuales son formulados para un lecho fijo unidimensional bajo régimen transitorio. El dominio espacial se definió a lo largo del eje axial del lecho, así como las variables de estado se expresaron como funciones del tiempo y de la coordenada axial. Esta formulación permitió capturar, de manera integrada, la evolución simultánea de concentración, carga adsorbida, temperatura y presión durante las distintas etapas del ciclo. La Figura 3 presenta el esquema del volumen de control del sistema modelado, donde se identifican las variables de estado, las condiciones de frontera y los flujos de entrada y salida

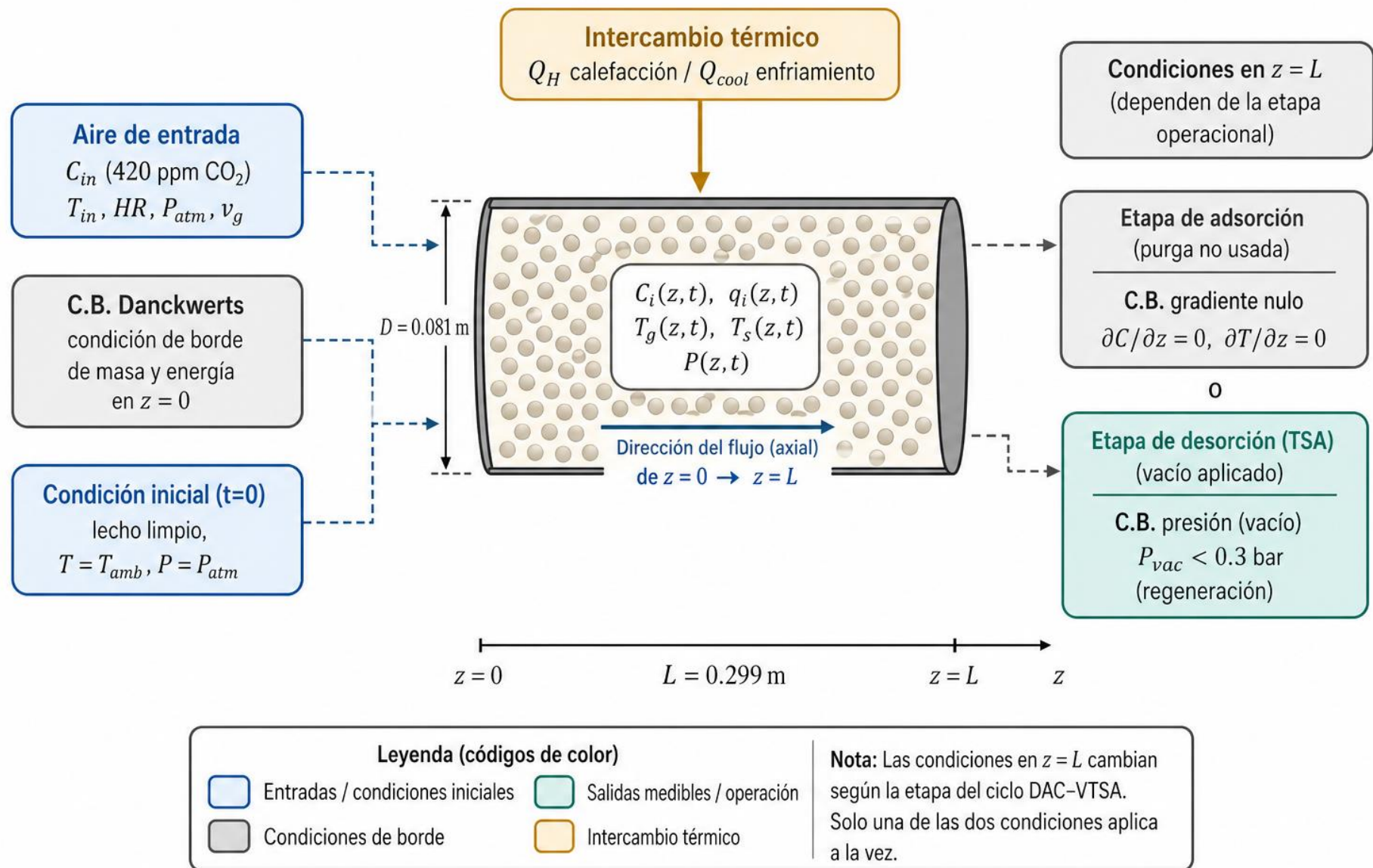


Figura 3: Esquema del volumen de control del lecho fijo DAC-VTSA. El flujo de aire opera en dirección axial ($z = 0 \rightarrow z = L$). Las condiciones de borde cambian según la etapa operacional del ciclo

El balance de masa para cada componente adsorbible i en la fase gaseosa se expresó como se muestra en la siguiente Ecuación (5) [Deschamps et al., 2022]:

$$\varepsilon_B \frac{\partial C_i}{\partial t} + u_g \frac{\partial C_i}{\partial z} = \varepsilon_B D_{ax} \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} - (1 - \varepsilon_B) \rho_s \frac{\partial q_i}{\partial t} \quad (5)$$

De este modo, C_i corresponde a la concentración molar del componente i en la fase gaseosa, y_i la fracción molar del componente i y D_{ax} el coeficiente de dispersión axial (el desarrollo completo se presenta en el Anexo B). El término N_i se modeló mediante un enfoque de LDF dual, en el que se distinguió la difusión a través de macroporos y microporos dentro del sorbente, tal y como se muestra en la Ecuación (4) presentada en la sección 3.2.

Así pues, $k_{LDF,i}$ es el coeficiente cinético y q_i^* la carga de equilibrio. Aunque simplificado, el enfoque permitió capturar la respuesta transitoria del lecho con un costo computacional moderado y una buena precisión para partículas de tamaño pequeño ($d_p < 1$ mm).

Del mismo modo, la dependencia térmica del coeficiente cinético se describió mediante una relación tipo Arrhenius, como se muestra en la Ecuación (6) [Ruthven, 1984]:

$$k_{LDF,i}(T) = k_{LDF,0} \exp\left(\frac{-E_{a_i}}{RT}\right) \quad (6)$$

Donde $k_{LDF,i}(T)$ es el coeficiente cinético del modelo LDF evaluado a la temperatura T , $k_{LDF,0}$ el factor pre-exponencial, E_a la energía de activación del componente i , R la constante universal de los gases y T la temperatura absoluta.

De esta forma, fue posible capturar la aceleración de los procesos de difusión intraparticular a mayores temperaturas, lo cual fue particularmente relevante durante las etapas de regeneración térmica.

Ahora bien, para el balance de energía se consideró la interacción térmica entre gas, sólido y pared, bajo condiciones de no adiabaticidad. El balance para la fase gaseosa se formuló como se muestra en la Ecuación (7) y para la fase sólida en la Ecuación (8) cuyos detalle se presenta en el Anexo C y Anexo D, respectivamente [Deschamps et al., 2022]:

$$\epsilon_B \rho_g C_{p,g} \frac{\partial T_g}{\partial t} + \epsilon_B \rho_g C_{p,g} u \frac{\partial T_g}{\partial z} - \lambda_{ax} \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2} + hgs \cdot a_p \rho_s (T_s - T_g) + U a_w (T_w - T_g) = 0 \quad (7)$$

Donde ϵ_B corresponde a la porosidad interparticular del lecho, ρ_g a la densidad de la mezcla gaseosa, $C_{\{p,g\}}$ al calor específico del gas a presión constante, T_g a la temperatura de la fase gaseosa, u_g a la velocidad superficial del gas, $\lambda_{\{ax\}}$ a la conductividad térmica axial efectiva, hgs al coeficiente de transferencia de calor gas-sólido, a_p al área superficial específica de partícula, ρ_s a la densidad del sólido adsorbente, T_s a la temperatura de la fase sólida, U al coeficiente global de transferencia de calor con la pared, a_w al área de pared por unidad de volumen de lecho y T_w a la temperatura de la pared (Ruthven, 1984).

$$(1 - \epsilon_B) \rho_s C_{p,s} \frac{\partial T_s}{\partial t} + h_{gs} \cdot a_p (T_g - T_s) - \sum_i \rho_s \Delta H_i \frac{\partial q_i}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

Donde $C_{\{p,s\}}$ corresponde al calor específico del sólido a presión constante, $\Delta H_{\{ads,i\}}$ al calor isostérico de adsorción del componente i y q_i a la carga adsorbida del componente i .

La energía generada o absorbida por adsorción se incorporó mediante el término $\Delta H_i \partial q_i / \partial t$, con ΔH_i negativo para procesos exotérmicos. Esta interacción fue de suma importancia para describir los picos térmicos durante la adsorción y el posterior enfriamiento en desorción, cuya magnitud influyó directamente en la eficiencia del ciclo.

El balance de momentum se describió con la ecuación de Ergun, válida para flujo estacionario y lechos granulares, como se muestra en la Ecuación (9) [Deschamps et al., 2022] :

$$-\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{150 \mu_g (1 - \epsilon_b)^2 u_g}{\epsilon_B^3 d_p^2} + \frac{1.75 \rho_g (1 - \epsilon_b) u_g^2}{\epsilon_B^3 d_p} \quad (9)$$

En esta Ecuación, P es la presión, μ la viscosidad del gas y d_p el diámetro medio de partícula. Dicha relación permitió cuantificar las pérdidas de carga a lo largo del lecho y constituir la base para que, posteriormente, se estimará el trabajo eléctrico, el cual estuvo asociado a ventiladores y bombas de vacío durante las distintas etapas del ciclo VTSA.

El conjunto de ecuaciones presentado conformó un sistema acoplado de ecuaciones diferenciales parciales, con las cuales se describió de manera coherente la evolución espacio-temporal del lecho adsorbente. Esta formulación constituyó el núcleo físico del modelo y

permitió, una vez discretizada espacialmente, simular ciclos completos de adsorción y regeneración bajo condiciones operacionales variables.

4.1.2. Isotermas y competencia CO_2-H_2O

Respecto al equilibrio de adsorción del sistema, se optó por la descripción mediante modelos de isoterma específicos para cada especie adsorbible, en la que se consideró, explícitamente, la naturaleza competitiva de la adsorción de CO_2 y el vapor de agua sobre sorbentes sólidos amina funcionalizada sobre celulosa nanofibrada. Como bien se mencionó anteriormente, la competencia entre ambas especies adsorbibles resulta particularmente relevante en los procesos de captura directa de aire ambiente, en tanto la presión parcial de CO_2 es extremadamente baja y la presencia de humedad puede modificar de manera significativa tanto la capacidad de adsorción como la cinética del proceso.

Por un lado, la adsorción de CO_2 se modeló mediante una isoterma de Toth. Esta fue seleccionada por su capacidad para representar adecuadamente la no idealidad del equilibrio a bajas presiones parciales, una condición característica de la captura directa desde aire. La expresión general de la isoterma de Toth se formula como se muestra en la Ecuación (10) [Deschamps et al., 2022]:

$$q_{CO_2}^{eq} = \frac{q_{m,CO_2} b_{CO_2} P_{CO_2}}{\left[1 + (b_{CO_2} P_{CO_2})^{t_{CO_2}}\right]^{1/t_{CO_2}}} \quad (10)$$

Donde, $q_{CO_2}^{eq}$ corresponde a la carga de equilibrio de CO_2 , q_{m,CO_2} es la capacidad máxima de adsorción, b_{CO_2} es el parámetro de afinidad del sorbente y t_{CO_2} es un parámetro

empírico que describe la heterogeneidad energética de los sitios activos. La dependencia térmica del parámetro de afinidad se incorporó mediante una relación tipo van't Hoff, donde ΔH_{CO_2} corresponde al calor de adsorción del CO_2 , tal y como se observa en la Ecuación (11) [Deschamps et al., 2022]:

$$b_{CO_2}(T) = b_{0,CO_2} \exp\left(-\frac{\Delta H_{CO_2}}{RT}\right) \quad (11)$$

Por otro lado, la adsorción de vapor de agua se describió mediante una isoterma del tipo Guggenheim–Anderson–de Boer, GAB, ampliamente utilizada para representar la adsorción de agua en materiales higroscópicos y sorbentes amínicos. La formulación adoptada se muestra en la Ecuación (12) [Deschamps et al., 2022]:

$$q_{H_2O}^{eq} = \frac{q_{m,H_2O} C K a_w}{(1 - K a_w)(1 - K a_w + C K a_w)} \quad (12)$$

De este modo, $q_{H_2O}^{eq}$ es la carga de equilibrio de agua, q_{m,H_2O} representa la capacidad monomolecular, C y K son constantes empíricas del modelo, y a_w es la actividad del agua aproximada por la humedad relativa del gas. Este modelo permitió reproducir la fuerte afinidad del sorbente por el vapor de agua a humedades moderadas y elevadas.

La competencia entre CO_2 y H_2O por los sitios activos del sorbente se incorporaron mediante un factor de corrección que modifica la capacidad efectiva de adsorción de CO_2 en función de la carga de agua adsorbida. El modelo competitivo se expresa tal y como se observa en la Ecuación (13) [Deschamps et al., 2022] :

$$q_{CO_2}^{eq, comp} = q_{CO_2}^{eq} [1 + \alpha q_{H_2O}^{eq}] \exp(\beta q_{H_2O}^{eq}) \quad (13)$$

Donde, α y β son parámetros empíricos que representan: el efecto promotor de la humedad a bajas cargas de agua, el cual está asociado a la formación de especies bicarbonato; y el efecto inhibidor dominante a mayores humedades, el cual es producto de la ocupación competitiva de los sitios activos. De esta manera, es posible capturar el comportamiento no monótono observado, experimentalmente, en sorbentes amínicos. En estos, la presencia de una cantidad moderada de agua incrementa, inicialmente, la capacidad de captura de CO₂, mientras que humedades elevadas conducen a una disminución neta de la adsorción.

La carga de equilibrio competitiva es utilizada directamente en el término cinético del modelo LDF, descrito en la sección anterior, lo que asegura el acoplamiento consistente entre equilibrio termodinámico y cinética de adsorción. De este modo, el modelo fue capaz de reproducir la influencia combinada de temperatura, presión parcial de CO₂ y humedad relativa sobre la dinámica del proceso VTSA; un aspecto fundamental para el análisis de escenarios climáticos característicos de regiones áridas.

Por consiguiente, la incorporación explícita de isothermas diferenciados y de un término competitivo, hizo posible que el modelo representará el comportamiento del sorbente bajo condiciones de operación propias de la captura directa de aire ambiente de manera realista. Esto constituyó un elemento clave para la posterior evaluación del desempeño del ciclo y de su sensibilidad frente a variaciones ambientales u operacionales.

4.1.3. Condiciones de frontera e hipótesis operacionales

El sistema de ecuaciones diferenciales parciales, descrito en las secciones 4.1.1 y 4.1.2, se resolvió imponiendo tanto condiciones de frontera como condiciones iniciales coherentes con la operación física de un proceso VTSA en lecho fijo. La correcta definición de estas condiciones resultó fundamental para asegurar que la estabilidad numérica y la conservación de masa y energía correspondieran a una representación realista del comportamiento dinámico del sistema durante las distintas etapas del ciclo.

Por ello, las condiciones iniciales se definieron al asumir un lecho parcialmente regenerado al inicio de la simulación, sin gradientes espaciales de concentración ni de temperatura. En el instante inicial $t = 0$, la fracción molar de CO_2 y la humedad del gas en el lecho se fijaron uniformemente con valores intermedios correspondientes a la etapa de adsorción y desorción. Así, la temperatura del gas y del sólido se igualaron a la temperatura de referencia del sistema. Esta elección permitió reducir efectos transitorios artificiales asociados a estados iniciales no físicos y facilitó la convergencia hacia un régimen periódico.

Las condiciones de frontera para los balances de masa se formularon mediante el esquema de Danckwerts, el cual combina adecuadamente los efectos de convección y dispersión axial en la entrada del lecho. Para cada componente adsorbible i , la condición en la entrada $z = 0$ se expresó como se muestra en la Ecuación (14) [Ruthven (1984)]:

$$D_{ax} \frac{\partial(C_{i,in})}{\partial z} \Big|_{z=0} = u[C_{i,in} - (C_{i,in})_{z=0}] \quad (14)$$

De este modo, en la Ecuación (15) $(Cy_i)_{in}$ corresponde a la concentración molar del componente en la corriente de alimentación. En la salida del lecho $z = L$, se impuso una condición de gradiente nulo, la cual representó un régimen plenamente desarrollado sin efectos de retrodispersión desde el exterior del dominio, como se observa en la Ecuación (15) [Ruthven, 1984]:

$$\frac{\partial(C_{i,in})}{\partial z} \big|_{z=L} = 0 \quad (15)$$

Para el balance de energía, se adoptaron condiciones de frontera análogas en las que se consideró el transporte convectivo de entalpía y dispersión térmica axial. En la entrada del lecho, la condición se formuló como se muestra en la Ecuación (16), mientras que en la salida se impuso nuevamente un gradiente térmico nulo, como se expone en la Ecuación (17). [Ruthven, 1984]. Mediante estas condiciones permitieron reproducir el intercambio térmico entre la corriente de entrada y el lecho adsorbente de forma consistente, así como la evolución térmica durante las etapas de calentamiento y enfriamiento.

$$\lambda_{ax} \frac{\partial T_g}{\partial z} \big|_{z=0} = \rho_g c_{p,g} u (T_{in} - T_{g,z=0}) \quad (16)$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial z} \big|_{z=L} = 0 \quad (17)$$

El control del ciclo VTSA se implementó mediante la definición explícita de etapas operacionales sucesivas; cada una caracterizada por condiciones de operación específicas de

presión, temperatura y composición de la corriente gaseosa. El ciclo incluyó las etapas de adsorción, evacuación inicial, precalentamiento, desorción térmica bajo vacío, purga y enfriamiento previo a la represurización. Las transiciones entre etapas se realizaron de manera continua, interpolando linealmente las variables de presión y temperatura durante intervalos temporales cortos, con el fin de evitar discontinuidades numéricas que puedan comprometer la estabilidad del integrador.

Durante la etapa de adsorción, el lecho operó a una presión cercana a la atmosférica y a una temperatura moderada con una corriente de aire ambiente que contenía concentraciones diluidas de CO_2 y vapor de agua. En las etapas de evacuación y desorción, la presión se redujo progresivamente hasta alcanzar el nivel de vacío establecido, mientras que la temperatura del sólido se incrementó para favorecer la regeneración del sorbente. La etapa de enfriamiento permitió restablecer las condiciones térmicas adecuadas antes del inicio del siguiente ciclo, lo que permite asegurar la reproducibilidad entre ciclos sucesivos.

El modelo se ejecutó durante múltiples ciclos completos hasta alcanzar un régimen cuasi estacionario periódico, definido como aquel en el que las variables de salida presentan variaciones relativas inferiores a un umbral predefinido entre ciclos consecutivos. Este criterio posibilitó garantizar que los resultados analizados puedan ser representativos de una operación continua y no dependan de condiciones iniciales particulares.

La definición consistente de condiciones de frontera, condiciones iniciales e hipótesis operacionales hizo posible que el modelo reproduzca de manera estable y físicamente coherente el comportamiento dinámico del proceso VTSA, proporcionando una base sólida para la implementación numérica detallada y los análisis paramétricos desarrollados en las secciones posteriores.

La simulación base contempla una columna de adsorción de longitud $L = 0.299$ m (299 mm), operando con aire atmosférico a 20°C y 30% de humedad relativa. La concentración de entrada de CO_2 se fijó en 420 ppm (aproximadamente 0.0166 mol/ m^3), representativa de la composición atmosférica actual. El tiempo total de simulación fue de 333 minutos (5.56 horas), durante el cual el lecho alcanza condiciones cercanas a un equilibrio dinámico aparente, donde la propagación del frente se estabiliza sin que se logre una saturación uniforme en todo el lecho, lo que condiciona la interpretación de los resultados en términos de eficiencia operativa máxima. La Tabla 5 resume los parámetros clave y resultados de la simulación base. Cabe destacar que la velocidad superficial resulta del caudal volumétrico de entrada (14 NL/min) por el cociente del área transversal del lecho ($D = 81$ mm), resultado una velocidad de $v_g = 0,045$ m/s.

Tabla 5: Resumen de parámetros por simular como caso base

Parámetro	Valor	Unidades
CONDICIONES OPERACIONALES		
Longitud del lecho (L)	299	mm
Diámetro del lecho (D)	81	mm
Temperatura de entrada	293 (20 °C)	K
Humedad relativa	30	%
Concentración de CO_2 en la entrada	420	ppm
Velocidad superficial del gas	0,045	m/s
Tiempo de simulación	333 (5.56 h)	min
RESULTADOS DE ADSORCIÓN DE CO_2		

Carga máxima de CO ₂	1.177	mol/kg
Carga promedio final de CO ₂	0.904	mol/kg
Utilización del adsorbente	76.8	%
Carga máxima de H ₂ O	2.200	mol/kg
Relación de selectividad CO ₂ /H ₂ O	< 1.0	—
EFFECTOS TÉRMICOS		
Incremento máximo de temperatura	8.19	K
Temperatura máxima del sólido	301.19 (28 °C)	K
Diferencia de temperatura sólido-gas	~0.5	K
ZONA DE TRANSFERENCIA DE MASA (MTZ)		
Longitud de la ZTM	50–100	mm
Velocidad de avance de la ZTM	0.9–1.0	mm/min

4.2. Implementación numérica y validación conceptual

El modelo matemático descrito en la sección anterior se implementó en el entorno de MATLAB 2025b, bajo un esquema de resolución modular que integró las ecuaciones de masa, energía y momentum con las isothermas de adsorción y la cinética LDF dual.

El enfoque de implementación se basó en el método de líneas (MOL, Method of Lines), la cual es una técnica ampliamente validada en modelaciones de lechos fijos unidimensionales por su eficiencia en la integración temporal de ecuaciones diferenciales parciales (EDP). Dicho método consistió en discretizar el dominio espacial mediante diferencias finitas, transformando las EDP en un conjunto acoplado de ecuaciones

diferenciales ordinarias (EDO). La formulación resultante se resolvió de forma simultánea al capturar la evolución temporal de las variables principales: concentración, temperatura, presión y carga adsorbida.

El dominio axial se discretizó en 50 nodos uniformes, valor determinado tras un análisis de independencia de malla donde la variación en la capacidad de adsorción global resultó inferior al 1 % al aumentar el número de nodos a 150. Esta resolución aseguró un equilibrio adecuado entre precisión y eficiencia computacional. La derivada difusiva se aproximó mediante un esquema centrado de segundo orden, mientras que la convección se trató con un esquema *upwind* de primer orden, el cual evita oscilaciones numéricas en regímenes de alto Número de Péclet axial.

El sistema de EDO acopladas se resolvió mediante el solver ODE15s (ver Anexo E), un solver implícito de paso variable basado en fórmulas de diferenciación hacia atrás (BDF). Dicho método se seleccionó por su robustez frente a la rigidez numérica del sistema, la cual es generada por la coexistencia de fenómenos de transporte de masa y calor con constantes de tiempo dispares.

Las tolerancias numéricas se fijaron en 10^{-6} , tanto para el error relativo como para el absoluto, lo cual garantizó la estabilidad del cálculo sin comprometer el tiempo de simulación. De este modo, el paso temporal se ajustó de forma adaptativa, según la variación de las derivadas locales de concentración y temperatura, lo que permitió capturar adecuadamente las transiciones rápidas entre etapas del ciclo VTSA.

La Figura 4 muestra el diagrama de flujo del algoritmo numérico implementado, donde se detallan los criterios de ruptura y convergencia cíclica que gobiernan la simulación.

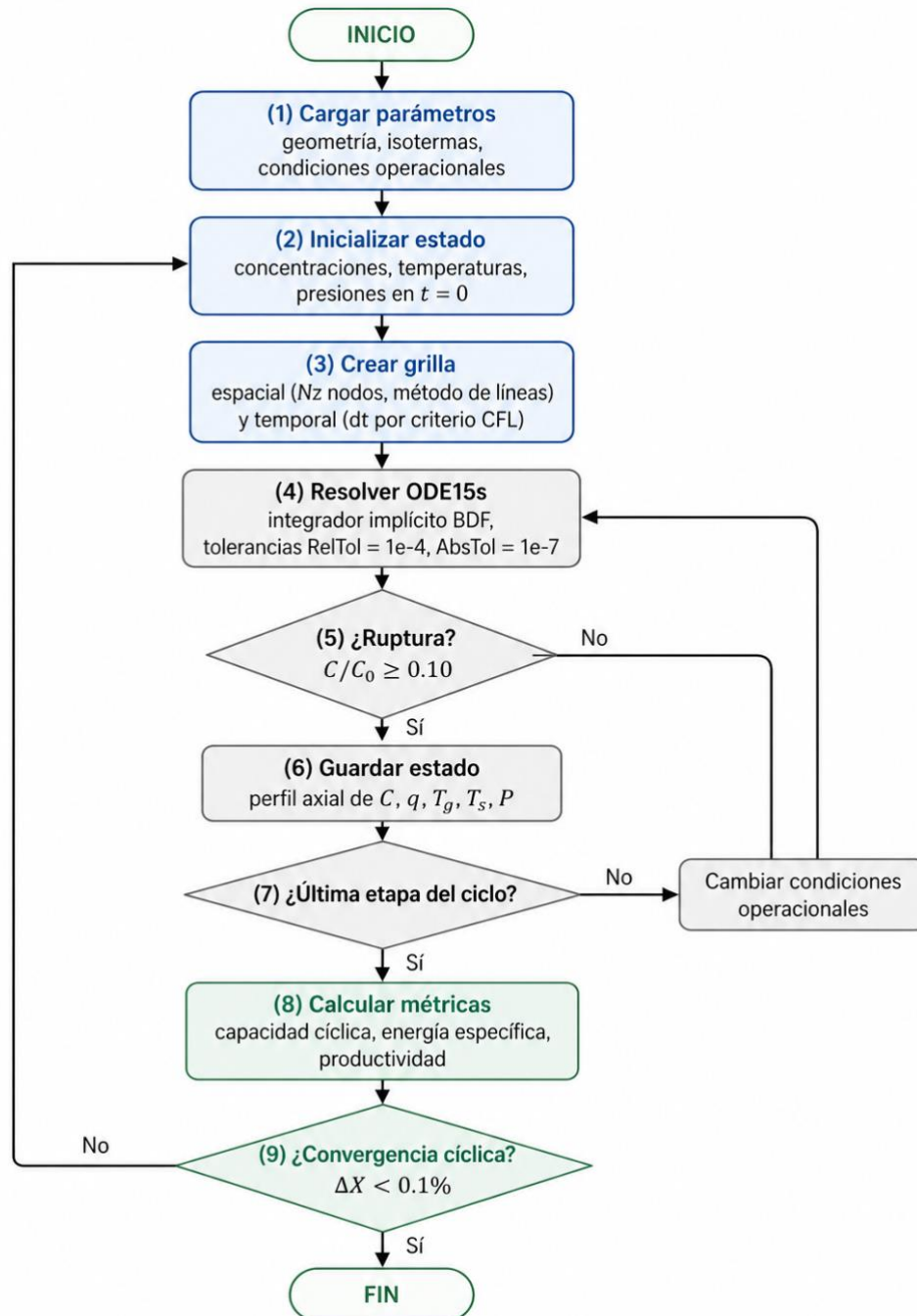


Figura 4: Diagrama de flujo del algoritmo numérico implementado en MATLAB para la simulación del ciclo VTSA. Los criterios de convergencia son $C/C_0 \geq 0.10$ para ruptura y $\Delta X < 0.1\%$ para convergencia cíclica.

4.2.1 Requerimientos computacionales

En términos de requerimientos computacionales, cada simulación de un ciclo completo VTSA se ejecutó en un equipo con procesador Intel Core i7 y 16 GB de RAM. El sistema de EDO resultante involucra $6 \times N_z = 300$ variables de estado simultáneas (con $N_z = 50$ nodos), integradas sobre un horizonte temporal de aproximadamente 8.300 segundos por ciclo. El tiempo de cómputo por ciclo completo fue de aproximadamente 3 a 8 minutos, dependiendo de la velocidad superficial del gas, la cual determina el paso de tiempo estable por criterio CFL.

Para el análisis paramétrico, cada barrido de una variable implicó entre 5 y 9 simulaciones independientes, con un tiempo total estimado de 2 a 4 horas por *sweep*. Estas características determinaron la elección de $N_z = 50$ como resolución espacial de referencia, valor que demostró convergencia espacial con desviaciones inferiores al 1% respecto a $N_z = 100$, según el análisis de independencia de malla descrito en la sección 4.2.2. La descripción detallada de cada módulo y su interrelación se presenta en el Anexo F.

4.2.2. Estabilidad, convergencia y reproducibilidad

El modelo alcanzó el estado estacionario tras varios ciclos sucesivos, condición en la cual las variables de salida presentaron una variación inferior al 0.1% entre iteraciones consecutivas. Este criterio de convergencia cíclica se adoptó como estándar de estabilidad operativa, la cual garantizó que el sistema se encontrará en un régimen repetitivo y representativo de la operación real de un proceso VTSA.

La verificación de estabilidad numérica se efectuó a través de una evaluación del Número de Courant–Friedrichs–Lewy (CFL), lo cual confirmó que el paso temporal

adaptativo del solver cumplía con las condiciones de estabilidad lineal ($CFL < 1$). Asimismo, se realizó un análisis de independencia de malla que permitió comparar los resultados obtenidos con 50, 100 y 150 nodos. De este modo, se verificó una convergencia espacial con desviaciones menores al 1%.

La reproducibilidad del modelo se aseguró a través de la estandarización de parámetros numéricos y del flujo de cálculo. Cada simulación siguió un procedimiento definido: (i) carga de parámetros iniciales y condiciones de frontera, (ii) resolución del sistema con ODE15s, (iii) almacenamiento de variables por nodo y tiempo, y (iv) postprocesamiento automatizado.

4.2.3. Validación del modelo

La validación del modelo se estructuró en dos niveles complementarios. El primero corresponde a la validación interna mediante verificación de conservación de masa y energía. El segundo consiste en la comparación externa de los resultados obtenidos con indicadores reportados en la literatura, tomando como referencia principal a Deschamps et al. (2022), fuente de los parámetros de equilibrio del sorbente empleado.

Para la validación interna, se verificó que el residual del balance de masa global, diferencia entre el CO₂ incorporado en la alimentación y el CO₂ acumulado en el sólido más el que sale en el efluente, fuese inferior al 2% en todos los casos. Este criterio se adoptó como condición mínima de coherencia numérica. Adicionalmente, se realizó un análisis de independencia de malla comparando 50, 100 y 150 nodos axiales, verificando que la variación en la capacidad de adsorción global sea inferior al 1%.

Para la validación externa, se compararon los siguientes indicadores con los valores reportados en Deschamps et al. (2022): capacidad de adsorción de CO₂ bajo condiciones de operación base, incremento de temperatura del sólido durante la adsorción, forma de la curva de ruptura y efecto de la humedad relativa sobre la capacidad cíclica. Se reconoce que la coincidencia en capacidad de equilibrio es parcialmente esperada, dado que los parámetros de la isoterma de Toth fueron tomados directamente del mismo paper. La validación independiente reside por tanto en los indicadores dinámicos: respuesta térmica, forma de la curva de ruptura y tiempo de ciclo. Los resultados de esta comparación se presentan en la sección 5.1.

4.3. Análisis de sensibilidad, escalamiento conceptual y alcances metodológicos

Una vez validado el modelo, se desarrolló un análisis de sensibilidad con la finalidad de examinar la influencia de los parámetros principales operacionales sobre el desempeño del proceso VTSA. Esta etapa metodológica permitió identificar los factores que dominan el comportamiento del sistema, establecer el rango de operación más eficiente y cuantificar la estabilidad del modelo frente a perturbaciones controladas. Posteriormente, se planteó un ejercicio de escalamiento conceptual que permitió extrapolar los resultados obtenidos a una escala de aplicación piloto, lo que asegura la consistencia física y energética con la literatura disponible.

4.3.1. Diseño experimental

El análisis de sensibilidad se implementó al seguir un enfoque determinista secuencial (*one-at-a-time, OAT*), en el que cada variable independiente se modificó de forma individual,

por lo que se mantuvieron las demás constantes en sus valores de referencia. Esta metodología se seleccionó por su capacidad para aislar los efectos específicos de cada parámetro sobre las magnitudes de salida, lo que garantiza una interpretabilidad directa de los resultados. En particular, hizo posible evaluar la estabilidad del modelo y verificar la coherencia física de las respuestas simuladas.

Las variables consideradas, y sus rangos de variación, se definieron en función de su impacto potencial en la capacidad de adsorción, la energía específica y la pureza del CO₂ recuperado. En consecuencia, la temperatura de desorción (T_{des}) se estableció en un rango de 353–383 K, el cual fue determinado por la estabilidad térmica del sorbente amínico y los valores reportados por Deschamps et al. (2022). La presión de vacío (P_{vac}) se fijó entre 0.05–0.3 bar, el cual es un rango operativo característico de sistemas VTSA de baja presión.

Del mismo modo, la humedad relativa (HR) tuvo un rango entre 0–80 %, los cuales son porcentajes representativa de las condiciones áridas del norte de Chile. Para la velocidad intersticial del gas (u) se determinó un intervalo entre 0.02–0.08 m/s, en tanto este intervalo controla el tiempo de residencia y, por ende, el equilibrio de adsorción. Por último, la longitud del lecho (L_b) se determinó entre 0.2–0.5 m, el cual es un rango que afecta la caída de presión y el perfil térmico axial.

Para cada variable se definieron cinco niveles de simulación, lo cual generó un total de 25 escenarios independientes. En cada caso, el modelo calculó la capacidad de trabajo (Δq_{CO_2}), la energía térmica específica (E_{th}), la energía eléctrica específica (E_{el}) y la eficiencia global del ciclo (η_{CO_2}). Así, las variaciones de ± 50 % respecto de las condiciones base permitieron explorar los límites operativos del sistema y evaluar su comportamiento frente a condiciones extremas de operación.

El análisis de sensibilidad se justificó metodológicamente porque los procesos DAC-VTSA presentan interacciones complejas entre temperatura, presión y humedad, en tanto son condiciones que afectan simultáneamente la adsorción y la regeneración. Por ejemplo, una reducción de la presión de vacío incrementa la capacidad regenerada, aunque también eleva el consumo eléctrico. Del mismo modo, a mayor temperatura de desorción mejora la recuperación del sorbente a costa de un mayor requerimiento térmico (Goeppert et al., 2019). La Tabla 6 resume las variables consideradas, sus rangos de variación y sus valores de referencia. Las demás condiciones se mantienen fijas en $P_{in} = 1.013$ bar, $C_{CO_2} = 420$ ppm y ciclo VTSA completo de 8 etapas.

Tabla 6: Variables del análisis de sensibilidad OAT, rangos de variación y valores de referencia.

Variable	Símbolo	Valor de referencia	Rango estudiado	Unidad
Temperatura de entrada	T_{in}	293 (20°C)	278 – 308 (5 – 25)	K (°C)
Humedad relativa	HR	0,40	0-0,80	-
Velocidad superficial del gas	u_g	0,044	0,04-0,60	m/s

Criterio de ruptura	C_{out}/C_{in}	0,10	0,05-0,98	-
---------------------	------------------	------	-----------	---

Frente a estas perturbaciones, la estabilidad del modelo se evaluó cuantificando la variación relativa de cada magnitud de salida respecto del caso base, como se muestra en la Ecuación (19). Bajo esta formula, S_x representa la sensibilidad normalizada, X la variable de salida y P el parámetro perturbado. Esta métrica permitió comparar directamente la influencia de los distintos parámetros en términos adimensionales.

$$S_x = \frac{\frac{\Delta X}{X_{ref}}}{\frac{\Delta P}{P_{ref}}} \quad (19)$$

La información obtenida a partir de este análisis se empleó posteriormente para orientar el diseño del escalamiento conceptual y definir los parámetros críticos que determinaron el desempeño técnico del sistema.

4.3.2. Alcances y limitaciones metodológicas

El modelo incorpora las siguientes simplificaciones, que delimitan su rango de aplicabilidad:

1. **Aproximación unidimensional:** el flujo se asume axial y uniforme; se omiten gradientes radiales de concentración y temperatura. Válida para $D < 0,1$ m (escala laboratorio), pero en la escala industrial ($D = 1,80$ m, $L/D \approx 1,0$) puede subestimar la dispersión lateral y la canalización de flujo por efecto de pared.

2. **Cinética LDF promedio:** los efectos de difusión macroporosa e intraparticular se integran en un solo coeficiente cinético. Reduce la resolución intraparticular pero mantiene una descripción adecuada de la dinámica global.
3. **Propiedades del sorbente constantes:** densidad, calor específico y conductividad térmica del sólido se consideran invariantes entre ciclos. No se modela degradación del sorbente ni variación de sitios activos por oxidación u otras causas.
4. **Sin acoplamiento con fuentes renovables:** el modelo no incorpora perfiles horarios de generación solar o eólica, lo que aísla los efectos del proceso base pero excluye la variabilidad operacional asociada a fuentes intermitentes.
5. **Enfriamiento del lecho no limitante:** el tiempo de enfriamiento previo a la readsorción se asume suficiente dentro de la duración del ciclo, sin modelar explícitamente la tasa de transferencia de calor durante esa etapa. En la práctica, el enfriamiento puede ser el paso limitante del ciclo cuando el sistema opera ajustado en tiempos.

Por último, el modelo asume que la etapa de enfriamiento previo a la represurización se completa dentro del tiempo asignado según Deschamps et al. (2022), sin evaluar la factibilidad térmica de ese enfriamiento en función de las condiciones del sistema. En un lecho real a escala industrial, las inercias térmicas son significativamente mayores que a escala de laboratorio: el lecho debe enfriarse desde $\sim 110^{\circ}\text{C}$ hasta $\sim 20^{\circ}\text{C}$ antes de iniciar un nuevo ciclo de adsorción, y ese proceso depende del área de transferencia de calor disponible, el caudal de gas de enfriamiento y las pérdidas al ambiente. Si el enfriamiento es insuficiente dentro del tiempo de ciclo asignado, el lecho inicia la adsorción a temperatura elevada, lo

que reduce la capacidad de captura por efecto termodinámico desfavorable sobre el equilibrio de adsorción. En sistemas donde los tiempos de ciclo son ajustados, se recurre a inyección de aire frío o purgas para acelerar el enfriamiento, estrategia que introduce un consumo energético adicional no contabilizado en este modelo. Esta limitación es relevante al escalar el sistema y constituye una variable de diseño a considerar en trabajos futuros.

Estas simplificaciones no invalidan la representación del fenómeno, sino que, en realidad, permitieron delimitar su rango de aplicabilidad al enmarcar el modelo como una herramienta predictiva de primer nivel. En el contexto de su uso práctico, este modelo buscó proporcionar una base metodológica robusta para analizar la captura de CO₂ en regiones húmedas de Chile, donde la alta humedad relativa favorece la adsorción sobre materiales amínicos y la alta disponibilidad de radiación solar permite considerar la integración con sistemas de calentamiento renovables.

En consecuencia, la formulación balanceada del modelo, entre rigor físico y eficiencia computacional, lo convierte en una herramienta idónea para estudios paramétricos y de pre-escalamiento, con lo cual se garantizó coherencia conceptual entre las fases numéricas y experimentales del proyecto.

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados de la simulación numérica del proceso DAC-VTSA empleando como material adsorbente una amina funcionalizada sobre celulosa nanofibrilada (Deschamps et al., 2022). La exposición sigue una progresión desde lo observable hacia lo interno: se comienza por la curva de ruptura como indicador operacional directo del desempeño del lecho, se examinan luego los perfiles internos de concentración y carga que explican ese comportamiento, se analiza la operación cíclica completa, y se finaliza con el análisis paramétrico de variables operacionales y el dimensionamiento de un sistema de operación continua.

El modelo empleado es unidimensional con balances acoplados de masa y energía, sin considerar degradación del sorbente, gradientes radiales, canalización de flujo, ni variación de la caída de presión entre ciclos. Estas simplificaciones implican que el modelo sobreestima la eficiencia de captura y subestima la dispersión observada en sistemas reales: en la práctica, la no uniformidad del flujo, la degradación del sorbente y las pérdidas térmicas reducen el desempeño respecto a los valores aquí reportados.

5.1 Validación del modelo

Antes de presentar los resultados operacionales del sistema, se expone la validación del modelo mediante comparación con la referencia de Deschamps et al. (2022).

Validación interna

El balance de masa global resultó en un residual inferior al 2% en todas las simulaciones realizadas, confirmando la coherencia numérica del modelo. El análisis de independencia

de malla verificó convergencia espacial con desviaciones menores al 1% entre 50 y 100 nodos axiales, respaldando la resolución adoptada.

Validación externa

La Tabla 7 resume la comparación entre los resultados del modelo y los valores reportados en Deschamps et al. (2022).

Tabla 7: Comparación cuantitativa modelo vs. Deschamps et al. (2022)

Parámetro	Deschamps et al. (2022)	Este modelo
Capacidad CO ₂ (~25°C, HR~40%)	0,9–1,1 mmol/g	0,958 mmol/g (a)
Calor de adsorción (ΔH_{ads})	~60 kJ/mol	60 kJ/mol (b)
Incremento térmico en adsorción	10–15 K	~8 K
Forma de la curva de ruptura	Tipo S, compacta	Tipo S, compacta
Efecto HR sobre capacidad	Máximo ~60% HR	Máximo 60% HR
Tiempo de ciclo VTSA	350–450 min	384 min

(a) La coincidencia es parcialmente esperada: los parámetros de la isoterma de Toth fueron tomados directamente de Deschamps et al. (2022), por lo que la capacidad de equilibrio reproduce por construcción los valores del paper. La validación independiente reside en los

indicadores dinámicos. (b) $\Delta H_{\text{ads}} = 60 \text{ kJ/mol}$ corresponde al valor paramétrico adoptado de la referencia.

Los indicadores con validación independiente son la respuesta térmica del lecho y la forma de la curva de ruptura. El incremento de temperatura durante la adsorción ($\sim 8 \text{ K}$ en el modelo vs. $10\text{--}15 \text{ K}$ experimental) está en el rango correcto, aunque ligeramente subestimado. Esta diferencia es coherente con las simplificaciones del modelo: la ausencia de gradientes radiales y la hipótesis de pared adiabática tienden a subestimar los picos térmicos locales. La forma sigmoidal compacta de la curva de ruptura, característica de sorbentes con isoterma favorable tipo Toth, se reproduce correctamente.

Una limitación relevante es que no se dispone de datos cuantitativos de tiempo de ruptura (t_{BT}) bajo condiciones idénticas a las simuladas, lo que impide una comparación directa del indicador operacional más importante. La validación realizada es de tendencias y órdenes de magnitud, coherente con el carácter conceptual del estudio. En consecuencia, el modelo puede considerarse validado en su comportamiento cualitativo y en los órdenes de magnitud de los indicadores dinámicos, con las limitaciones propias de un modelo unidimensional de primer nivel.

Como referencia complementaria, los resultados del modelo son consistentes con las tendencias reportadas por Wurzbacher et al. (2012) para sorbentes amínicos sobre sílica, quienes observan incrementos de temperatura durante la adsorción del orden de 10 a 15 K y tiempos de ruptura en el rango de 60 a 120 minutos para columnas de escala similar. Stampi-Bombelli et al. (2020) reportan capacidades cíclicas entre $0,5$ y $1,2 \text{ mmol/g}$ para sorbentes amínicos operando en ciclos TSA, rango dentro del cual se sitúa el valor obtenido en este trabajo ($0,880 \text{ mmol/g}$). Estas comparaciones no constituyen una validación cuantitativa

directa, dado que los sorbentes, las geometrías y las condiciones operacionales difieren, pero confirman que los órdenes de magnitud y las tendencias del modelo son físicamente razonables.

5.2 Curva de ruptura y eficiencia de captura

La curva de ruptura describe cómo evoluciona la concentración de CO₂ en la salida del lecho a lo largo del tiempo de operación. Es el indicador operacional más directo del sistema, ya que determina cuándo el lecho debe dejar de adsorber e iniciar la regeneración.

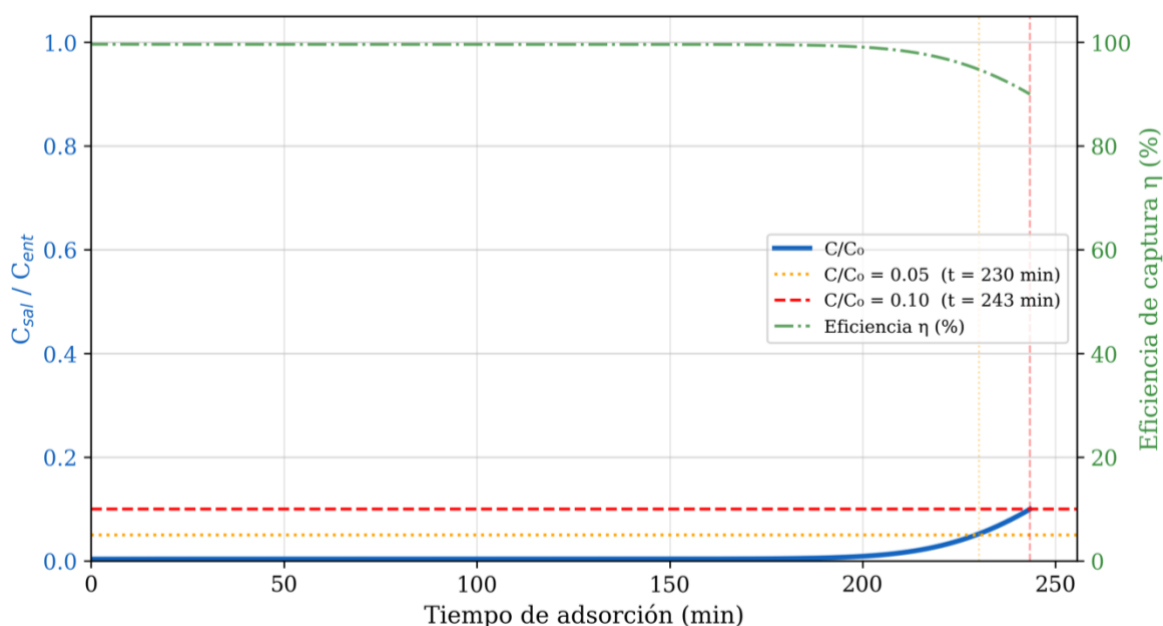


Figura 5: Curva de ruptura normalizada y eficiencia de captura de CO₂ (modelo 1D bajo condiciones ideales: sin degradación ni canalización)

La Figura 5 muestra la concentración normalizada C/C_0 en la salida del lecho y la eficiencia de captura $\eta = 1 - C/C_0$. Durante los primeros 250 minutos, la concentración de CO₂ en el efluente es prácticamente nula: el gas que sale del lecho tiene casi el mismo CO₂

que el aire limpio tratado, lo que equivale a una eficiencia de captura superior al 99%. A partir de los 250 minutos, la concentración comienza a aumentar y la eficiencia cae. Esta caída ocurre de forma relativamente abrupta porque la zona activa de captura, que avanza progresivamente desde la entrada hacia la salida del lecho, sale por el extremo en un intervalo corto de tiempo, como se explicará en la sección 5.2.

El criterio convencional de ruptura al 5% ($C/C_0 = 0,05$) se alcanza a los 297 minutos. Para este trabajo se adopta el criterio operacional de 90% de eficiencia ($C/C_0 = 0,10$) como punto de corte, que ocurre a los 290 minutos con una capacidad acumulada de 0,87 mol/kg y un factor de utilización del 74% respecto a la capacidad máxima del material.

Es importante distinguir dos situaciones: la adsorción base, que corresponde a la simulación con lecho inicialmente regenerado y limpio, y la operación cíclica estacionaria, en la que el lecho inicia cada ciclo con una carga residual de CO_2 de $\sim 0,044$ mol/kg que no pudo ser removida en la regeneración. Esta carga residual reduce el tiempo disponible de adsorción a aproximadamente 246 minutos por ciclo. Los tiempos de 297 y 290 minutos corresponden a la adsorción base; el tiempo operacional en régimen continuo es 246 minutos. Usar el primer valor para el diseño del ciclo llevaría a sobreestimar la producción real del sistema.

La eficiencia próxima al 100% durante los primeros 250 minutos es consecuencia directa de los supuestos del modelo: una cinética de adsorción rápida y una baja dispersión axial generan una zona de transición compacta que tarda en llegar a la salida. Si la cinética fuera más lenta o la dispersión mayor, la caída de eficiencia comenzaría antes. En sistemas reales, la distribución no uniforme del flujo y el envejecimiento del sorbente reducen este

período de alta eficiencia. Por esto, los resultados aquí presentados sobreestiman el desempeño esperado en un sistema físico real.

5.3 Perfiles de concentración y carga en el lecho

La curva de ruptura descrita en la sección anterior responde al siguiente proceso interno: a medida que el gas de alimentación pasa por el lecho, el CO_2 es capturado en la zona de entrada; cuando esa zona se satura, la captura ocurre un poco más adentro; y así sucesivamente hasta que la zona activa de captura llega a la salida y el CO_2 comienza a aparecer en el efluente. Los perfiles axiales de concentración y carga permiten visualizar directamente este proceso.

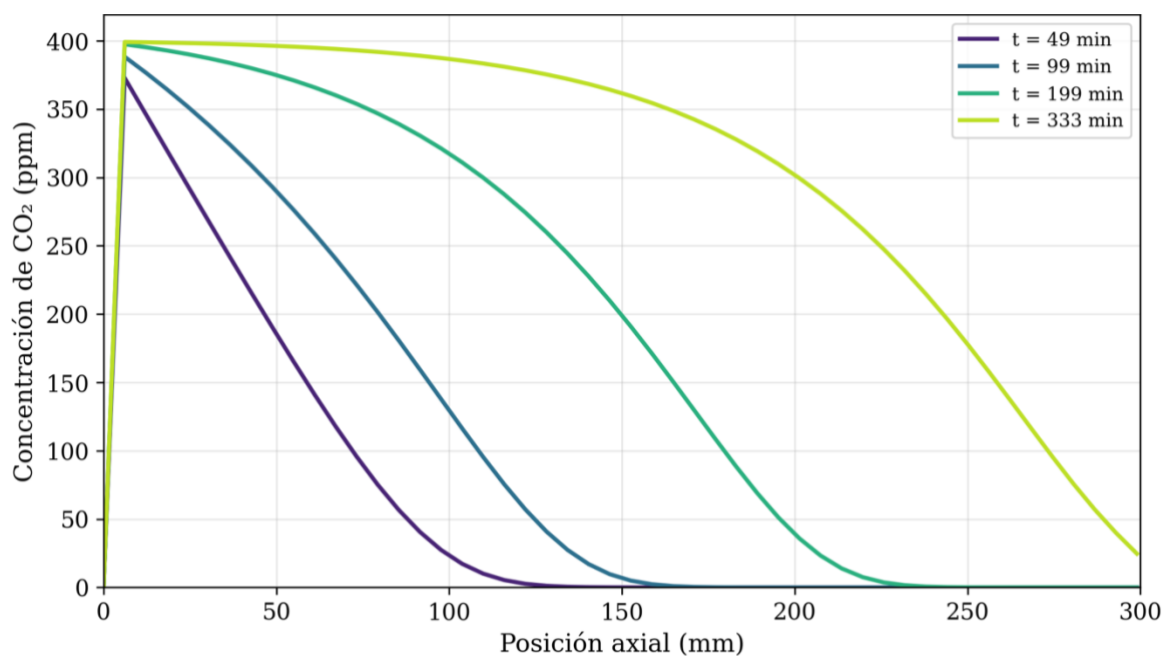


Figura 6: Perfiles axiales de concentración de CO_2 en la fase gas a diferentes tiempos operativos

La Figura 6 muestra cómo varía la concentración de CO_2 a lo largo del lecho en distintos momentos. En tiempos tempranos ($t = 49$ min), el CO_2 se agota prácticamente en la zona de entrada: la concentración cae de ~ 400 ppm a cero en los primeros 50–80 mm. Con el tiempo, esta transición se desplaza hacia la salida manteniendo una forma relativamente compacta. La extensión de esta zona de transición, donde la concentración cae de su valor de entrada al cero, se denomina zona de transferencia de masa (ZTM) y tiene una extensión estimada de 50–100 mm para las condiciones simuladas.

La compacidad de la ZTM tiene una explicación en las propiedades de equilibrio del sorbente: la isoterma de Toth empleada tiene una pendiente que disminuye a medida que aumenta la concentración de CO_2 , lo que significa que el sorbente "compite menos" por el CO_2 a concentraciones altas que a concentraciones bajas. Esta característica hace que la zona de transición tienda a mantenerse estrecha en lugar de ensancharse con el tiempo. Si la isoterma tuviera el comportamiento opuesto, pendiente creciente con la concentración, la zona de transición se ensancharía progresivamente y la ruptura sería más gradual.

El gradiente pronunciado cerca de la entrada del lecho ($z = 0$) es consistente con la condición de borde del modelo en esa posición, donde se impone la concentración de alimentación de forma directa.

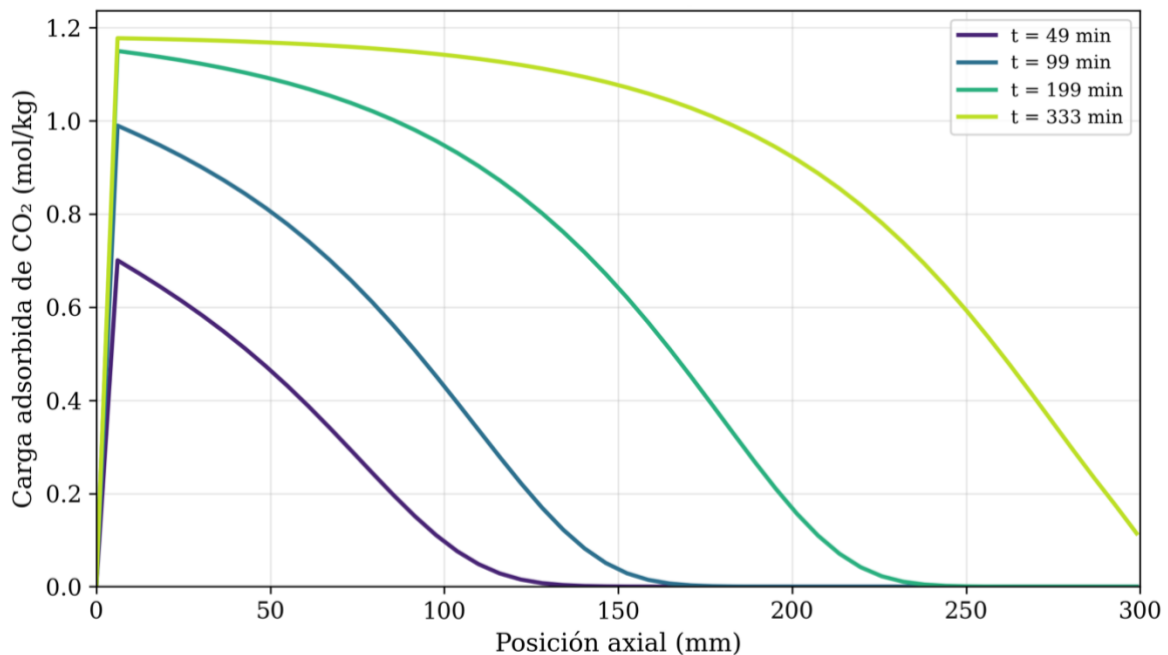


Figura 7: Evolución temporal de perfiles de carga adsorbida de CO₂ a lo largo del lecho fijo

Los perfiles de carga de la Figura 7 muestran el mismo proceso desde la perspectiva del sólido: la zona de entrada alcanza rápidamente valores cercanos a la capacidad máxima del material (1,177 mol/kg), mientras que las zonas más alejadas de la entrada aún no han sido expuestas al CO₂. El factor de utilización del 74% al momento de la ruptura no indica que un 26% del lecho haya sido desperdiciado: indica que ese 26% aún estaba en proceso de carga cuando se alcanzó el criterio de corte. Todo el volumen del lecho participa en la captura, pero lo hace de forma secuencial a medida que la zona activa avanza.

5.4 Co-adsorción CO₂-H₂O y efecto de la humedad

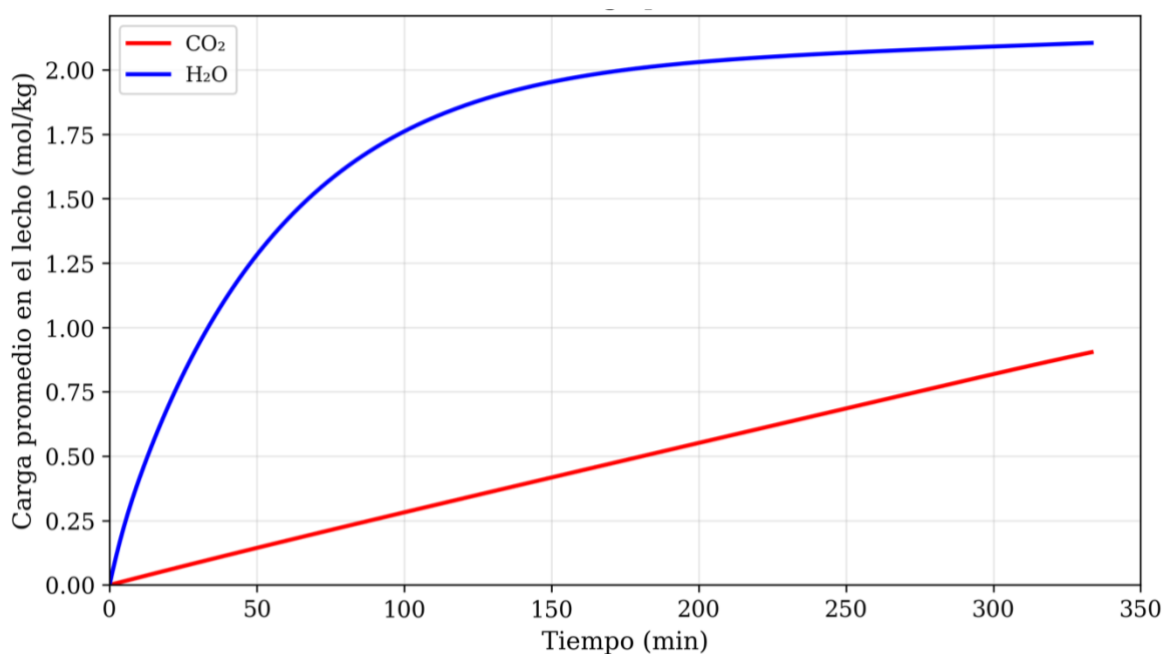


Figura 8: Co-adsorción CO₂/H₂O: carga promedio del lecho

Dado que el proceso opera con aire ambiente, el sorbente adsorbe simultáneamente CO₂ y vapor de agua. La Figura 8 muestra la evolución de la carga promedio de ambas especies. La carga de H₂O alcanza ~2,1 mol/kg al final del ciclo, más del doble de la de CO₂ (~0,9 mol/kg). Esto se debe a que el vapor de agua está presente en mayor concentración que el CO₂ en el aire ambiente, incluso a humedades moderadas.

Para el sorbente amínico empleado, la presencia de agua no es solo un efecto competitivo. En condiciones secas, el CO₂ reacciona con los grupos amina formando carbamato, lo que requiere dos grupos amina por molécula de CO₂ capturada. En presencia de agua, se favorece la formación de bicarbonato, que requiere solo un grupo amina por molécula. Esto significa que el agua puede aumentar la cantidad de CO₂ capturado por unidad

de masa de sorbente, lo que explica el aumento de capacidad observado hasta ~60% HR en el análisis paramétrico (sección 5.8).

Sin embargo, la mayor carga de H₂O tiene un costo en la regeneración: el agua adsorbida también debe ser removida durante la etapa de desorción térmica (TVSA), lo que consume energía adicional. El calor requerido para desorber el agua (~44 kJ/mol) es comparable al del CO₂ (~60 kJ/mol), y dado que la masa de agua adsorbida supera a la de CO₂, el balance energético de la regeneración puede estar dominado por el agua. Por tanto, la humedad afecta simultáneamente la capacidad de captura y el costo energético de la regeneración, en sentidos no siempre alineados, aspecto que se retoma en la sección 5.8.

5.5 Evolución espaciotemporal de la concentración de CO₂

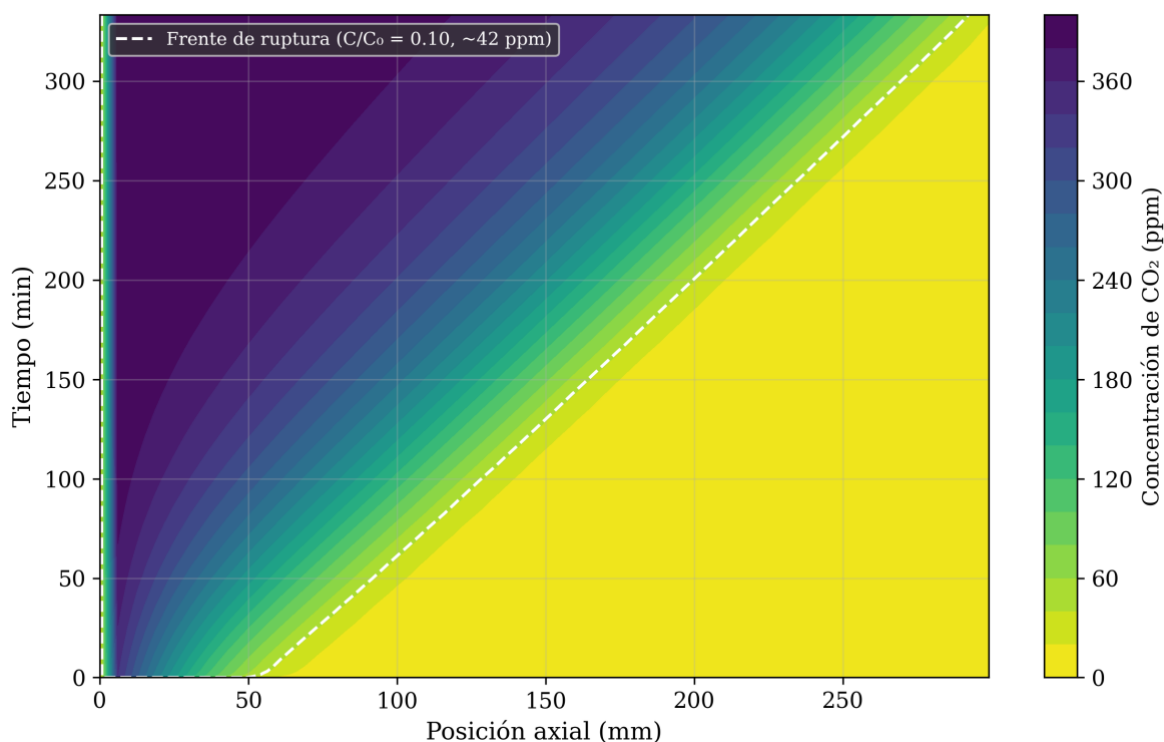


Figura 9: Distribución espaciotemporal de concentración de CO₂

El mapa de la Figura 9 integra en una sola imagen toda la información de los perfiles de concentración a lo largo del tiempo. El eje horizontal representa la posición axial en el lecho, el eje vertical el tiempo de operación, y el color la concentración de CO₂: tonos oscuros indican alta concentración (~400 ppm) y tonos claros indican baja concentración (~0 ppm).

La zona oscura en la esquina superior izquierda corresponde a la entrada del lecho ($z \approx 0$) en tiempos avanzados, donde el sorbente ya se saturó y el CO₂ pasa sin ser capturado. La zona clara en la parte inferior derecha corresponde a posiciones más alejadas de la entrada en tiempos tempranos, donde el sorbente aún no ha sido expuesto al CO₂. La línea blanca punteada indica el punto donde $C/C_0 = 0.10$ (~42 ppm), que corresponde al criterio

operacional de ruptura: el instante en que, para cada posición axial, la concentración de CO_2 alcanza el 10% de la concentración de entrada. Esta línea avanza con velocidad aproximadamente constante de 0,9–1,0 mm/min, lo que es coherente con el balance de masa en el lecho bajo condiciones de operación estables.

Respecto a la utilización del lecho: la zona clara no representa volumen que no capta CO_2 . Representa el lecho activo, donde la captura está ocurriendo. Lo que el mapa muestra es que la captura se realiza de forma secuencial: primero la zona de entrada, luego zonas más distantes. Todo el volumen del lecho participa en la captura a lo largo del ciclo.

5.6 Dinámica térmica durante los ciclos VTSA

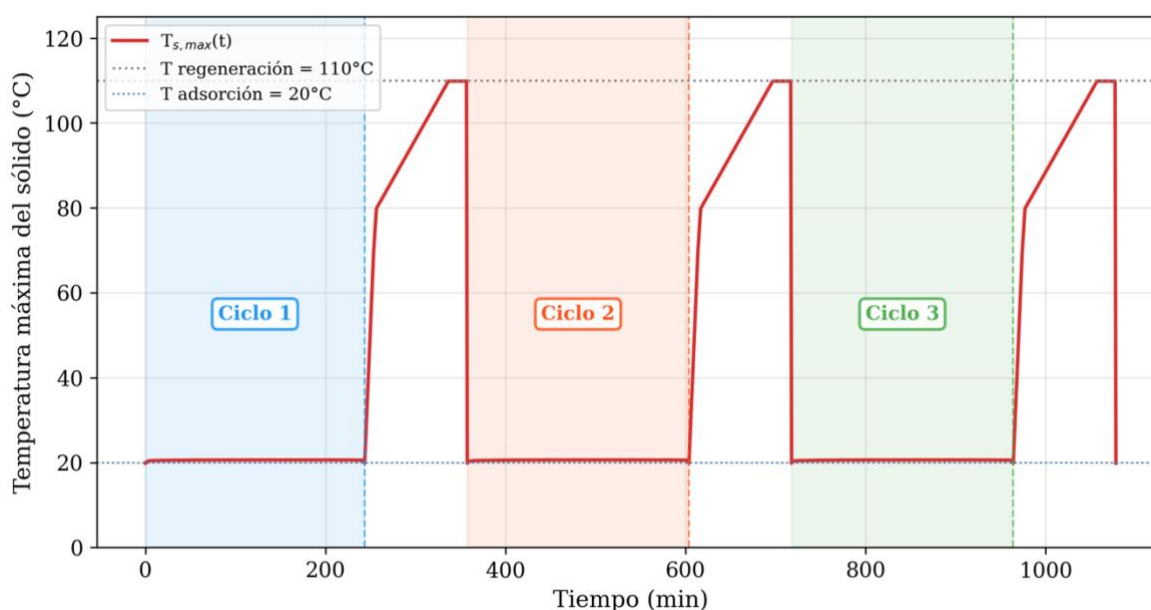


Figura 10: Temperatura máxima del sólido durante 3 ciclos VTSA

La Figura 10 muestra la evolución de la temperatura máxima del sólido adsorbente durante los tres ciclos. Durante la adsorción el sistema se mantiene cerca de los 20°C. Al iniciar la regeneración, la temperatura asciende hasta los 110°C requeridos para promover la desorción del CO₂. Las transiciones muestran cierta gradualidad asociada a las etapas de precalentamiento y enfriamiento incluidas en el ciclo. En un sistema físico real, las inercias térmicas del lecho y los equipos auxiliares producirían transiciones más graduales. La repetibilidad del perfil entre ciclos confirma que el sistema opera en régimen estable desde el segundo ciclo.

5.7 Operación cíclica y estado estacionario

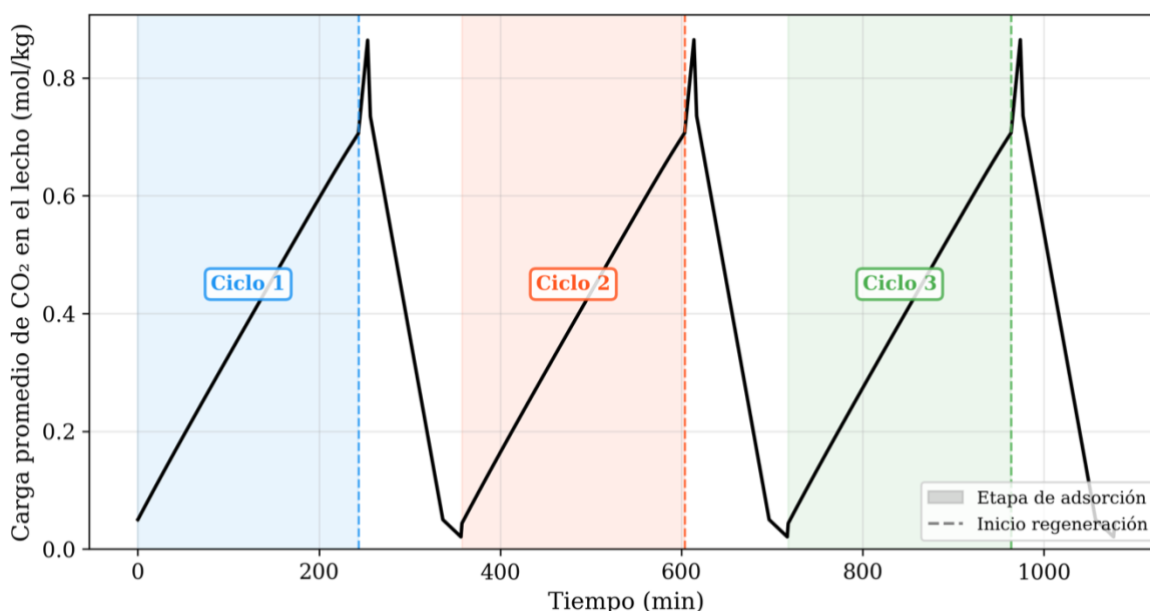


Figura 11: Evolución de la carga promedio de CO₂ durante 3 ciclos VTSA completos

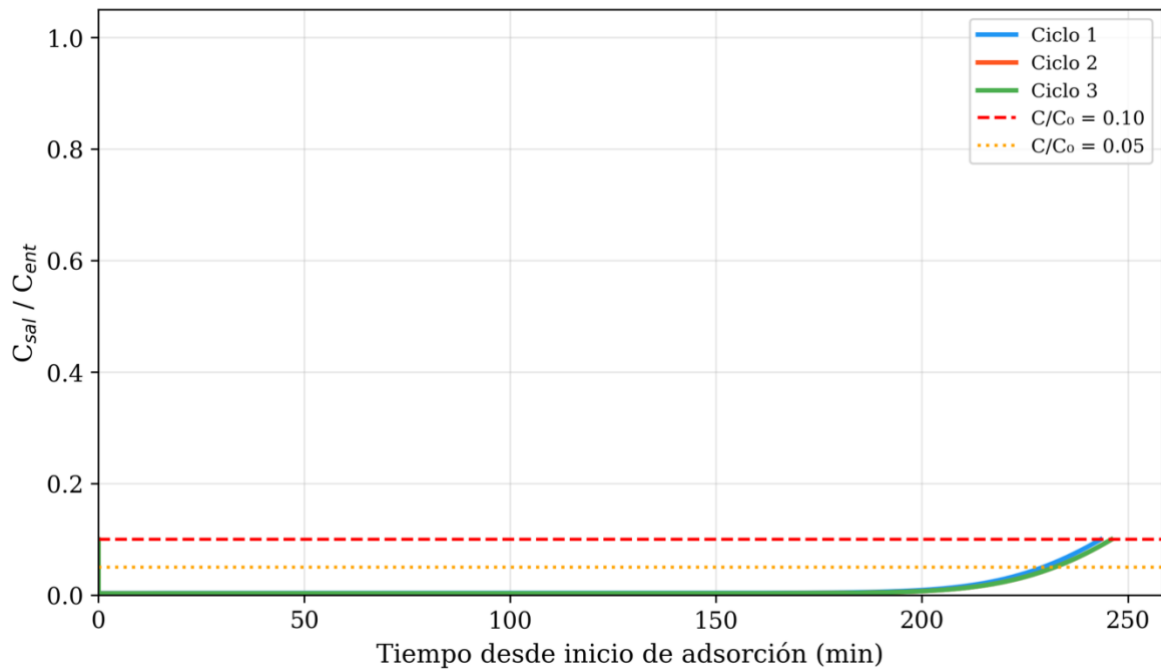


Figura 12: Reproducibilidad de la curva de ruptura entre ciclos VTSA consecutivos

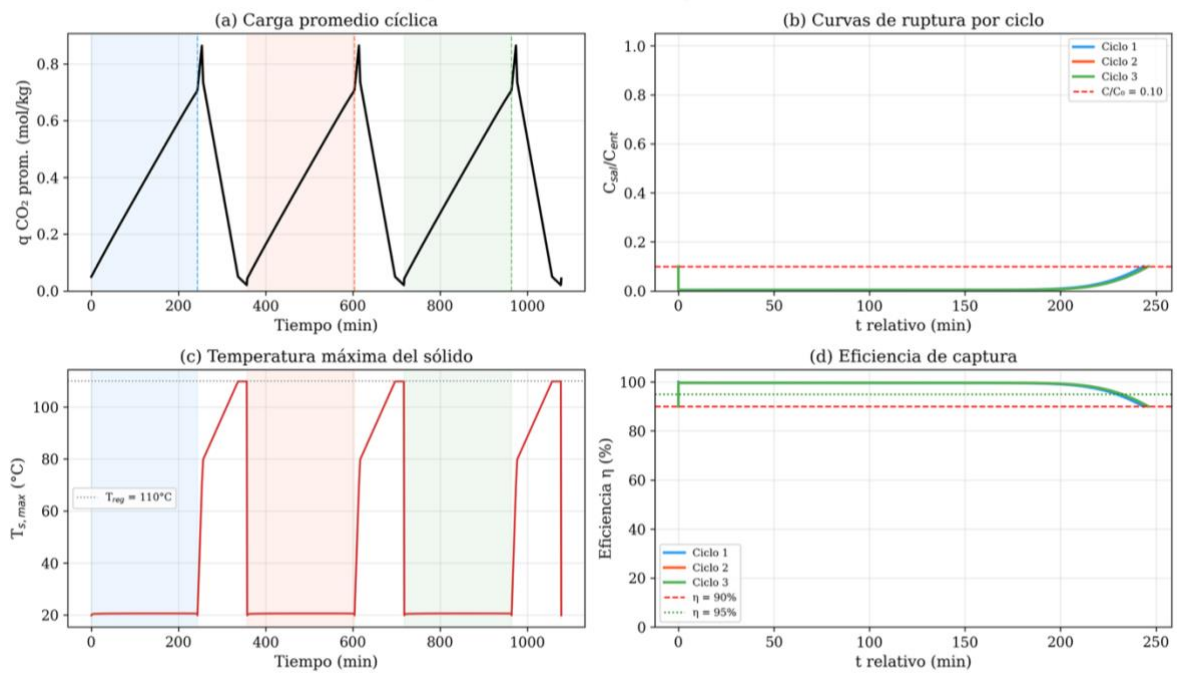


Figura 13: Panel completo: carga, ruptura, temperatura y eficiencia

La Figura 11 muestra la evolución de la carga promedio de CO₂ en el lecho durante los tres ciclos completos. El patrón es periódico: la carga aumenta durante la adsorción y disminuye durante la regeneración, pero no hasta cero, porque la regeneración es incompleta. Esta carga residual ($\sim 0,044$ mol/kg) es CO₂ que queda retenido en el sorbente tras cada regeneración y que el siguiente ciclo de adsorción no puede recuperar.

El resultado central de esta sección es que la capacidad cíclica, la cantidad de CO₂ efectivamente capturada y recuperada por ciclo, converge a 0,880 mmol/g a partir del segundo ciclo y se mantiene constante en el tercero. Esto indica que el sistema alcanza un régimen de operación estable y repetible a partir del segundo ciclo, lo que valida el uso de la simulación de dos ciclos como representación del estado operacional continuo.

La diferencia entre la capacidad cíclica (0,880 mmol/g) y la capacidad máxima de la adsorción base (1,177 mol/kg) se explica por dos factores: el criterio de corte adoptado ($C/C_0 = 0,10$), que detiene la adsorción antes de la saturación completa del lecho, y la carga residual al inicio de cada ciclo, que reduce el volumen efectivo disponible para nueva adsorción.

La Figura 12 muestra las curvas de ruptura de los tres ciclos en tiempo relativo. La superposición casi completa entre los ciclos 2 y 3 confirma la estabilidad del proceso.

La diferencia del ciclo 1 refleja el período de arranque desde lecho limpio. El panel de la Figura 13 integra los cuatro indicadores principales: carga, ruptura, temperatura y eficiencia, permitiendo verificar la coherencia general del sistema en régimen de operación.

5.8 Dimensionamiento del sistema en operación continua

Con un solo lecho la captura es intermitente: durante la regeneración no hay adsorción activa. Para mantener una captura continua de CO₂, se requiere operar múltiples lechos en paralelo con los ciclos desfasados en el tiempo, de modo que mientras un lecho se regenera, otro esté adsorbiendo.

A partir de los tiempos del ciclo estacionario:

- $t_{adsorción} = 246 \text{ min}$
- $t_{regeneración} = 138 \text{ min}$ (evacuación + precalentamiento + prepurga + desorción TVSA + purga vapor + represurización)
- $t_{ciclo \text{ total}} = 384 \text{ min}$

El número mínimo de lechos para garantizar operación continua es $N_{mín} = \left\lceil \frac{t_{ciclo}}{t_{adsorción}} \right\rceil = \lceil 384 / 246 \rceil = 2 \text{ lechos}$

Con $N = 2$, el sistema opera en el límite: cualquier variación en los tiempos podría generar intervalos sin captura activa. Para una operación robusta se recomienda $N = 3$ lechos,

con un desfase temporal entre ellos de: $\Delta t_{desfase} = \left\lceil \frac{t_{adsorción}}{N} \right\rceil = \lceil 246 / 3 \rceil = 82 \text{ min}$

Con esta configuración, cuando el primer lecho alcanza su criterio de ruptura, el segundo lleva 82 minutos en adsorción y opera normalmente, y el tercero acaba de completar su regeneración e inicia un nuevo ciclo. En todo momento hay al menos un lecho en adsorción activa. Esta es la lógica de diseño representada en el PFD de la Figura 1. La velocidad de

operación y el número de lechos son decisiones interdependientes: a mayor velocidad superficial, menor tiempo de adsorción, menor desfase requerido y potencialmente menor número de lechos necesarios.

5.9 Análisis paramétrico de variables operacionales

Se evaluó el efecto de cuatro variables sobre la capacidad cíclica del sistema: velocidad superficial del gas, temperatura de entrada, humedad relativa y criterio de ruptura. Para cada variable se variaron sus valores manteniendo las demás constantes (análisis OAT). La capacidad reportada corresponde al segundo ciclo VTSA completo, representativo del régimen de operación estable. Una limitación del análisis OAT es que no captura interacciones entre variables: el efecto combinado de temperatura y humedad, por ejemplo, no queda cuantificado.

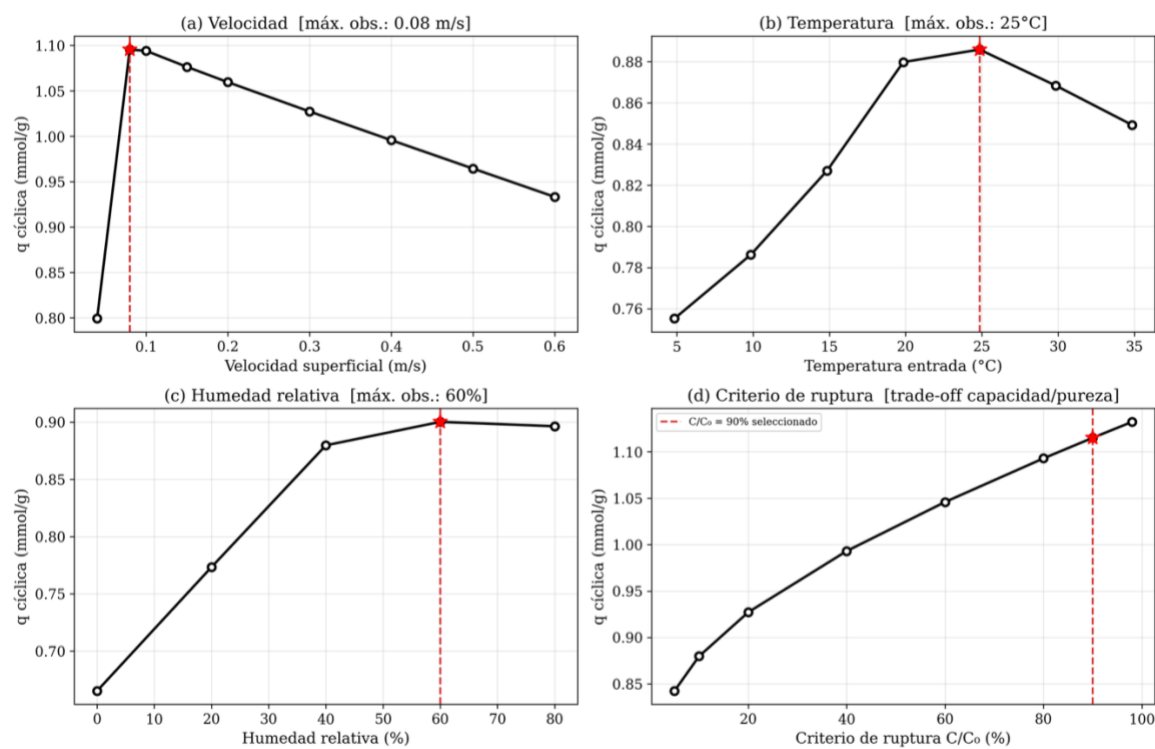


Figura 14: Análisis paramétrico DAC-VTSA. Capacidad cíclica del CO_2 (ciclos VTSA completos, por lotes cíclico).

Como se muestra en la Figura 14 resumen, de las cuatro variables evaluadas, la humedad relativa es la más determinante: la diferencia entre operar a 0% HR (0,665 mmol/g) y al máximo observado a 60% HR (0,900 mmol/g) representa un aumento del 35% en la capacidad cíclica. Por comparación, la variación de temperatura produce hasta un 27% de diferencia entre sus extremos, y la velocidad un 17%. Esta jerarquía es coherente con la centralidad del mecanismo de reacción del sorbente amínico: la presencia de agua modifica cuántos grupos amina se utilizan por molécula de CO_2 capturada, lo que impacta directamente la capacidad del material.

La velocidad superficial muestra un máximo de 1,096 mmol/g a $v = 0,08$ m/s. A velocidades menores, el ciclo se extiende en el tiempo sin capturar proporcionalmente más CO₂. A velocidades mayores, el gas tiene menos tiempo de contacto con el sorbente y la captura es menos completa. La velocidad de 0,044 m/s usada en la simulación base está por debajo de este máximo, lo que indica que hay margen para aumentar la productividad del sistema operando a mayor velocidad, aunque a costo de mayor caída de presión.

La temperatura de entrada muestra un máximo de capacidad a 25°C. A temperaturas más bajas, el equilibrio favorece la adsorción de CO₂ pero también aumenta la co-adsorción de H₂O, cuya regeneración incompleta reduce la capacidad cíclica neta en ciclos consecutivos. A temperaturas más altas, el equilibrio de adsorción de CO₂ se vuelve menos favorable. El máximo a 25°C representa el balance entre estos efectos dentro del rango evaluado.

La humedad relativa muestra un máximo a 60% HR, consecuencia del mecanismo de bicarbonato ya descrito en la sección 5.3. Sin embargo, este es el punto crítico que el análisis de capacidad por sí solo no resuelve: operar a 60% HR maximiza la captura de CO₂, pero también maximiza la carga de H₂O en el sorbente, lo que aumenta la energía de regeneración requerida. La condición de máxima capacidad de captura no coincide necesariamente con la condición de menor costo energético por tonelada de CO₂ capturado.

Esta pregunta, cuál es el punto operacional que minimiza el costo energético total, no fue cuantificada en este estudio y constituye la extensión más relevante del trabajo.

Por último, una limitación del enfoque OAT es que no captura interacciones entre variables. El caso más relevante es la interacción $HR \times T$: si bien la humedad relativa maximiza la capacidad cíclica a 60% HR y la temperatura lo hace a 25 °C, no es posible confirmar que este óptimo se mantenga cuando ambas variables se perturban simultáneamente. Para resolver esta pregunta, un diseño factorial 2^2 (dos niveles de HR y dos de T, más puntos centrales) requeriría entre 5 y 9 simulaciones adicionales y permitiría cuantificar el efecto de interacción con un costo computacional moderado. Esta extensión se considera prioritaria para trabajos futuros orientados a la selección de sitio en el contexto climático chileno.

5.10 Trade-off entre criterio de ruptura y capacidad cíclica

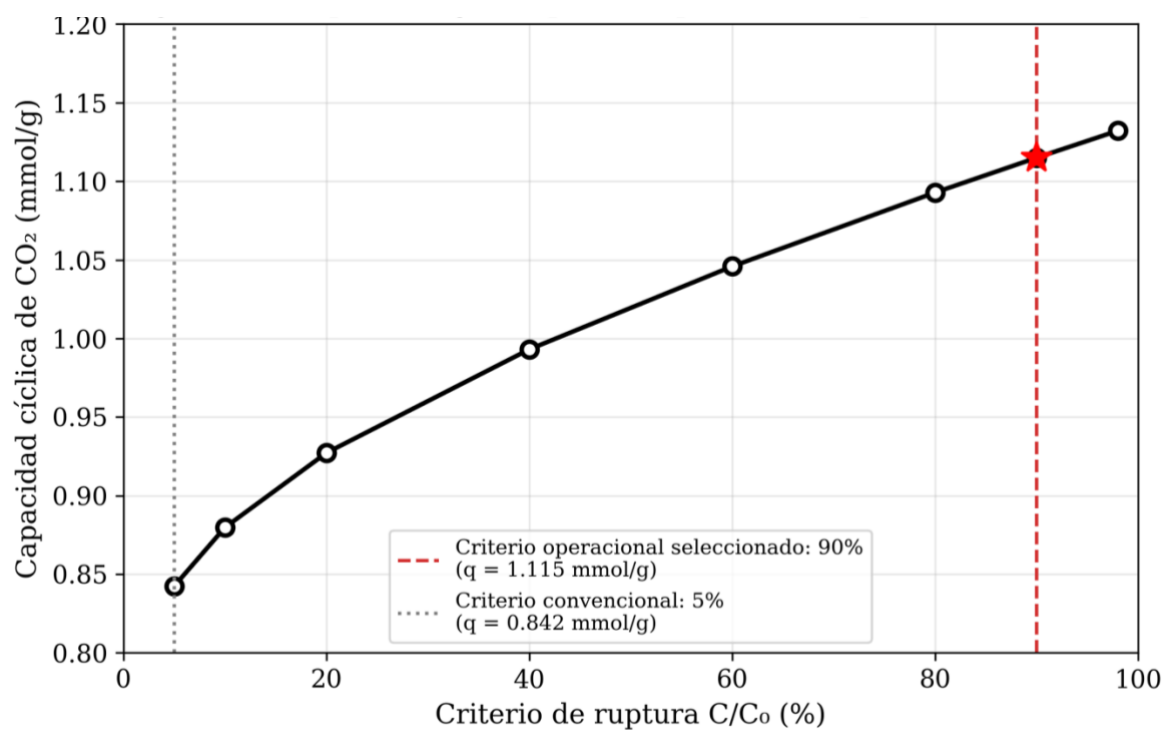


Figura 15: Trade-off criterio de ruptura y capacidad cíclica (mayor C/C_0 implica mayor capacidad pero menor pureza del efluente)

El criterio de ruptura define el momento en que se detiene la adsorción. A mayor criterio (más CO₂ permitido en el efluente), mayor fracción del lecho es utilizada antes de la regeneración y mayor capacidad cíclica se obtiene: de 0,843 mmol/g al 5% hasta 1,132 mmol/g al 98%, una diferencia del 34%.

El costo de aumentar el criterio es una menor calidad del gas tratado durante las etapas finales del ciclo: a $C/C_0 = 0,90$, la concentración de CO₂ en el efluente durante ese período es de 360 ppm, prácticamente igual al aire sin tratar. El criterio de 90% adoptado en este trabajo ($C/C_0 = 0,10$) representa un balance entre maximizar la captura y mantener una eficiencia aceptable: permite capturar 1,115 mmol/g manteniendo la concentración del efluente por debajo de 40 ppm durante la mayor parte del ciclo. La elección final depende de los requerimientos específicos del proceso y del balance entre mayor capacidad de captura y menor frecuencia de ciclos de regeneración.

5.11 Escalamiento

La simulación desarrollada en las secciones anteriores corresponde a una columna de laboratorio de 81 mm de diámetro y 299 mm de longitud. Para trasladar estos resultados a una planta piloto de aproximadamente 10 tCO₂/día, es necesario explicitar dos decisiones de diseño independientes: la definición del módulo industrial y la determinación del número de módulos requeridos para alcanzar la producción objetivo.

La columna de laboratorio no escala geométricamente a condiciones industriales. En consecuencia, el módulo industrial corresponde a una decisión de rediseño, en la cual los parámetros cinéticos y de equilibrio del sorbente (isotermas de Toth y GAB, y coeficientes

LDF) se asumen invariantes con la escala, bajo la hipótesis del modelo unidimensional. Esta suposición es válida en la medida en que el régimen de flujo y el tamaño de partícula se mantengan dentro de los rangos considerados en la modelación.

El módulo industrial adoptado ($D = 1,80$ m, $H = 1,78$ m, $Q = 1,8$ Nm³/s) corresponde a la geometría definida del modelo en MATLAB, y se selecciona como representativo de instalaciones DAC a escala de demostración (Chen et al., 2025). Los criterios de selección son los siguientes:

a) **Fabricación estándar:** El diámetro de 1,80 m corresponde a un tamaño compatible con procesos de fabricación industrial bajo normativa ASME.

b) **Relación geométrica (L/D):** El módulo presenta una relación $L/D \approx 1,0$, situándose en el límite inferior del rango recomendado para lechos empacados ($L/D \geq 2$) según Ruthven (1984). Este valor puede inducir desviaciones respecto a flujo ideal, lo cual no es capturado por el modelo unidimensional y constituye una limitación explícita del diseño.

c) **Caída de presión:** La velocidad superficial estimada ($v_g = 0,707$ m/s) es consistente con valores reportados en la literatura. Sin embargo, su impacto sobre la caída de presión a escala industrial no se evalúa explícitamente, lo que representa un aspecto crítico no resuelto, considerando que en sistemas DAC la potencia de ventilación puede dominar los costos operacionales.

A modo de estimación de orden de magnitud, la ecuación de Ergun aplicada a las condiciones del módulo industrial ($v_g = 0,707$ m/s, $d_p = 7,2$ mm, $\varepsilon = 0,446$, $\rho_g = 1,2$ kg/m³, $\mu = 1,8 \times 10^{-5}$ Pa·s, $H = 1,78$ m) arroja una caída de presión de ~ 850 Pa. Considerando un caudal de 1,8 Nm³/s por columna, esto implica una potencia de ventilación del orden de 2,2 kW por columna, equivalente a aproximadamente 145 kW para las 66 columnas en operación

simultánea. Este valor representa del orden de un 3% del consumo energético total del sistema, bajo las condiciones evaluadas, lo que sugiere que la caída de presión, si bien no fue modelada dinámicamente, no altera de manera significativa las conclusiones económicas del análisis.

El número de columnas se determina directamente a partir de los resultados de la simulación, siguiendo una secuencia de cálculo consistente:

En primer lugar, la producción por columna se estima a partir de la capacidad cíclica del sistema. Considerando una capacidad de 0,958 mol CO₂/kg, una masa de sorbente de 1.003,7 kg por columna, un peso molecular de 0,044 kg/mol y una frecuencia de operación de 3,75 ciclos diarios, se obtiene una producción de 158,7 kg CO₂/día por columna. El dimensionamiento se realizó utilizando la capacidad de equilibrio del primer ciclo (0,958 mmol/g) en lugar de la capacidad cíclica estacionaria (0,880 mmol/g). Esta decisión se tomó en base a que el escalamiento busca dimensionar la capacidad instalada del sistema, no su operación en régimen. En operación estacionaria, la producción efectiva por columna sería de aproximadamente un 8% menor (146 kg CO₂/día), lo que podría compensarse operacionalmente mediante ajustes en el tiempo de adsorción o en el criterio de ruptura. El análisis económico incorpora esta holgura de forma implícita al utilizar la clasificación de estimación Clase 5 (de ±50%).

A partir de este valor, el número mínimo de columnas necesarias para alcanzar una producción de 10.000 kg/día se calcula como: $N_{\min} = \lceil 10.000 / 158,7 \rceil = 63$ columnas

Con el fin de asegurar operación continua bajo un esquema cíclico, el sistema se organiza en tres grupos desfasados, por lo que el número total de columnas debe ser múltiplo de tres. En consecuencia: $N_{\text{total}} = \lceil 63 / 3 \rceil \times 3 = 66$ columnas

Finalmente, la producción total del sistema se verifica como: Producción total = $66 \times 158,7 = 10.474 \text{ kg/día} \approx 10,47 \text{ t/día}$

Tabla 8: Comparación entre escala de laboratorio y sistema industrial

Parámetro	Escala laboratorio	Escala industrial
Diámetro	81 mm	1.800 mm
Altura	299 mm	1.780 mm
Relación L/D	3,7	1,0
Masa de sorbente	85 g	66,2 t (total)
Producción de CO ₂	0,3 g/ciclo	10,47 t/día
Número de unidades	1	66

La configuración resultante se representa en el diagrama de flujo de proceso (PFD) de la Figura 16 donde las 66 columnas se organizan en tres grupos de 22 unidades operando con un desfase temporal de 82 minutos.

La configuración definida, compuesta por 66 columnas, determina directamente la estructura de costos del sistema. En particular, los principales componentes de inversión en equipos son los siguientes:

- Sorbente amínico: $66,2 \text{ t} \times 20 \text{ USD/kg} = 1,32 \text{ MUSD}$
- Sistema térmico (caldera + intercambiador): $1.717 \text{ kW} = 1,57 \text{ MUSD}$
- Columnas de adsorción: $66 \text{ unidades} \times 8.922 \text{ USD/u} = 0,59 \text{ MUSD}$
- Válvulas automatizadas: $396 \text{ unidades} \times 600 \text{ USD/u} = 0,24 \text{ MUSD}$

Lo anterior conduce a una inversión total en equipos de 5,35 MUSD y a un CAPEX total de 8,10 MUSD, considerando factores indirectos y utilidades del primer año.

Por su parte, el costo operativo anual asciende a 1,19 MUSD, dominado por los costos de mano de obra (42%) y combustible de regeneración (36%). La relación entre OPEX y

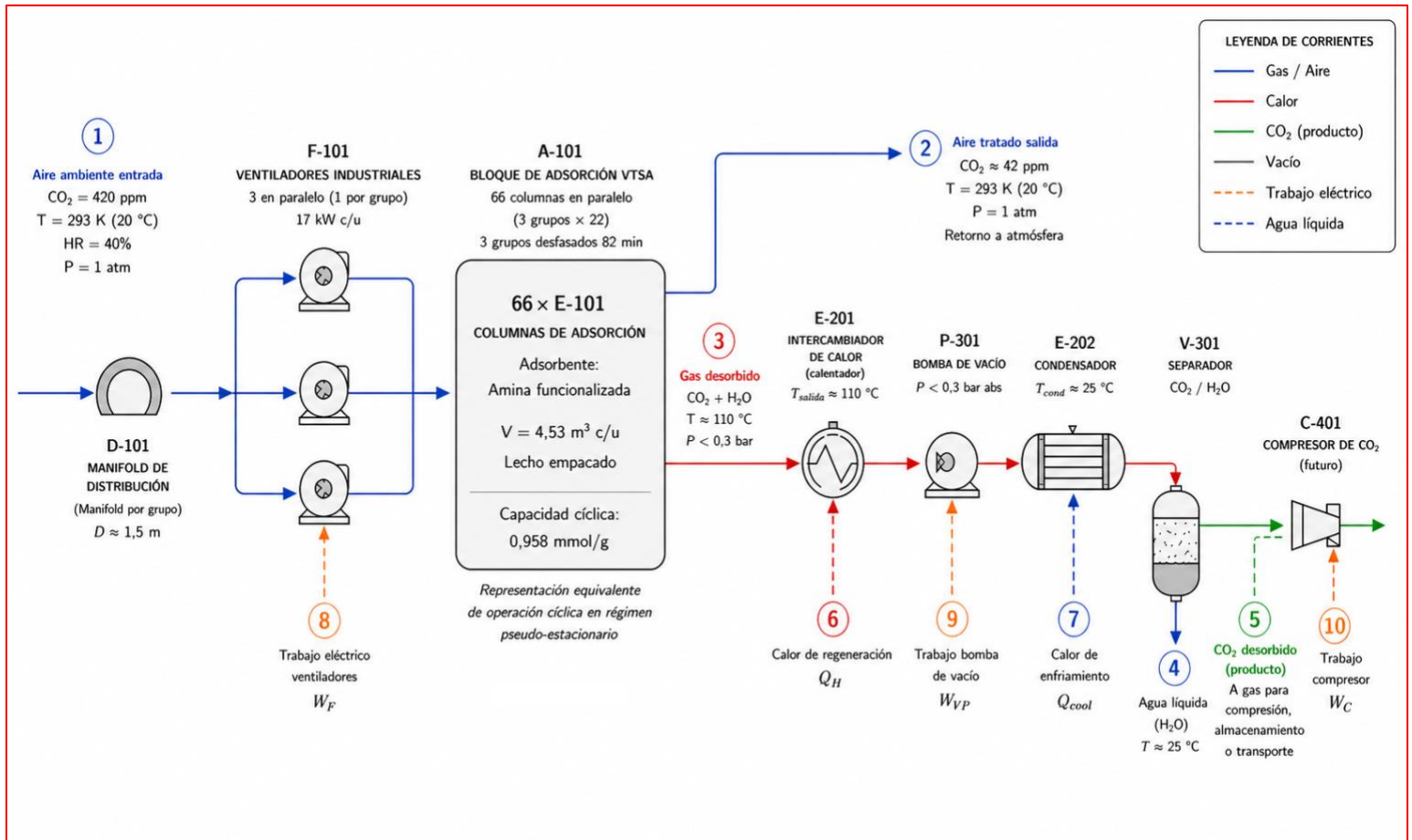


Figura 16: Diagrama de flujo de proceso (PFD) del sistema de captura directa de CO₂ mediante adsorción tipo VTSA

5.12 Análisis de costos

El análisis económico del proceso DAC-VTSA se desarrolla como una estimación cuyo objetivo es determinar el costo de captura resultante, el precio mínimo de venta necesario para viabilidad financiera, y los factores que más influyen en ambos indicadores. El costo de captura es el resultado del análisis y se obtiene del cociente entre los costos operativos anuales y la producción modelada. El análisis corresponde a una planta piloto mediana de ~ 10 tCO₂/día, escala que se deriva directamente de los parámetros de la simulación, como se detalla en la sección 4.3.2 de escalamiento.

Tabla 9: Supuestos económicos generales del análisis

Parámetro	Valor	Unidad
Producción objetivo	3.822	t CO ₂ /año (~ 10 t/día)
Número de columnas	66	u (3 grupos $\times$ 22)
Tasa de descuento	5%	—
Horizonte de análisis	20	años
Tasa impositiva	27%	—
Precio sorbente amínico	20	USD/kg
Precio gas/combustible	8,0	USD/GJ
Precio electricidad	0,10	USD/kWh

5.12.1 Inversión de capital (CAPEX)

La Tabla 10 presenta el desglose de inversión de capital. El CAPEX total asciende a USD 8,1 M, estructurado a partir del inventario de equipos más los factores estándar de instalación (15%), operación base (6%), instrumentación (6%) y auxiliares (2%) sobre el costo de equipos, más las utilidades del año base.

Tabla 10: Desglose CAPEX

Categoría	Costo (USD)	% CAPEX
Equipos	5.352.385	66,1%
Instalación	802.858	9,9%
Factores indirectos	749.334	9,3%
Utilidades año 1	1.192.617	14,7%
CAPEX TOTAL	8.097.194	100,0%

El desglose completo de equipos por ítem se presenta en el Anexo G.

El sorbente amínico (USD 1,3 M, 24% CAPEX) y el sistema térmico de regeneración (USD 1,6 M, 19% CAPEX) son los dos ítems dominantes, representando en conjunto el 36% de la inversión. El precio del sorbente adoptado es USD 20/kg, valor representativo para sorbentes amínicos funcionalizados reportado en literatura (Fasihi et al., 2019; McQueen et al., 2021; rango USD 15–30/kg). El costo de columnas (USD 589 k) se estimó a partir de recipientes a presión de acero al carbono de tamaño equivalente, sin incluir factores de diseño específicos para vacío parcial, lo que constituye una limitación de la estimación.

5.12.2 Costos operativos anuales (OPEX)

El OPEX anual en el año base asciende a USD 1,19 M, desglosado en la Tabla 11. El combustible para regeneración térmica ($14,17 \text{ GJ/tCO}_2 \times 3.822 \text{ t/año} \times 8 \text{ USD/GJ}$) representa USD 433 k/año (36,3% del OPEX), mientras que la mano de obra alcanza USD 500 k/año (42%) y el mantenimiento USD 161 k/año (13%), calculado al 3% del costo de equipos, valor dentro del rango típico del 2–5% para plantas de proceso continuo (Peters & Timmerhaus, 2003).

Tabla 11: Desglose OPEX

Componente	USD/año	% OPEX
Combustible regeneración	433.104	36,3%
Electricidad (total)	68.941	5,8%
Mano de obra	500.000	41,9%
Mantenimiento	160.572	13,5%
Agua de proceso	30.000	2,5%
TOTAL OPEX	1.192.617	100,0%

A diferencia de sistemas DAC a gran escala, donde el mantenimiento puede dominar el OPEX por el elevado número de unidades, en esta planta piloto la mano de obra y el combustible de regeneración son los componentes principales, representando el 78% del OPEX total. Esto refleja que a escala de 66 columnas el proceso es más intensivo en operación que en mantenimiento de equipos.

5.12.3 Costo de captura y precio de equilibrio

El costo de captura, calculado como OPEX/producción, asciende a USD 312/tCO₂. Este valor se ubica dentro del rango reportado para tecnologías DAC en etapa conceptual (IEA, 2023: USD 400–1.000/tCO₂) y es coherente con estimaciones para sistemas de adsorción a escala de demostración.

En perspectiva comparada con la literatura, el valor obtenido es consistente con estimaciones para sistemas DAC-VTSA con sorbentes amínicos a escala demostrativa. Fasihi et al. (2019) reportan un rango de USD 300–1.000/tCO₂ para sistemas actuales, con proyección de reducción a USD 100–300/tCO₂ hacia 2050 mediante aprendizaje tecnológico y economías de escala. McQueen et al. (2021) sitúan los costos de sistemas demostrativos con sorbentes sólidos en USD 250–600/tCO₂. El costo declarado por Climeworks para sus plantas Orca y Mammoth es del orden de USD 1.000/tCO₂ a escala comercial temprana, con objetivo de USD 300–400/tCO₂ hacia 2030. El valor obtenido en este trabajo (USD 312/tCO₂, corregido a ~USD 342/tCO₂) se ubica en el límite inferior de ese rango, lo que es esperable para una estimación Class 5 con supuestos optimistas de escala piloto. Cabe señalar que el requerimiento energético del sistema simulado (14,17 GJ/tCO₂) es aproximadamente el doble del rango reportado para VTSA optimizados en literatura (6–8 GJ/tCO₂), lo que indica que los tiempos de ciclo heredados de Deschamps et al. (2022) sin optimización no corresponden a un diseño energéticamente eficiente. Un ciclo optimizado reduciría el consumo energético y, por tanto, el OPEX y el costo de captura.

El precio de equilibrio, precio mínimo de venta para el cual el Valor Actual Neto es cero bajo tasa de descuento del 5% y horizonte de 20 años, se estimó en USD 426/tCO₂. La Tabla 12 presenta el VAN para distintos precios de venta.

Tabla 12: VAN según precio de venta de CO₂

Precio (USD/t CO₂)	VAN (M USD)	Payback (años)	¿Viable?
312	-7,8	>20	No
400	-1,5	24,1	No
426	0,0	18,6	Precio de equilibrio
500	4,1	11,3	Sí
750	18,1	4,8	Sí
1000	32,0	3,1	Sí

El flujo de caja detallado para el horizonte de 20 años se presenta en el Anexo H.

El mercado voluntario de carbono cotizó entre USD 400 y USD 1.000/tCO₂ en 2024–2025 (IEA, 2023; Fasihi et al., 2019). El precio de equilibrio de USD 426/tCO₂ se ubica dentro de ese rango, lo que indica que el proyecto es financieramente viable bajo precios de mercado actuales para una planta piloto de ~10 tCO₂/día con la geometría de módulo simulada.

El período de recuperación de 18,6 años al precio de equilibrio (USD 426/tCO₂) excede los horizontes típicos de inversión privada en la industria química (8 a 12 años). La viabilidad financiera del proyecto, en su configuración actual, depende de la existencia de contratos de compra de largo plazo en el mercado voluntario de carbono o de instrumentos de política pública que reduzcan el riesgo de inversión. La viabilidad técnica demostrada en este trabajo no debe interpretarse como viabilidad de inversión sin dichas condiciones habilitantes.

5.12.4 Análisis de sensibilidad del precio de equilibrio

La Tabla 13 presenta la sensibilidad del precio de equilibrio ante variaciones en los principales parámetros. La variable de mayor impacto es la escala de producción: reducir a 5 tCO₂/día (33 columnas) eleva el punto de equilibrio a USD 511/t, mientras que escalar a 15 tCO₂/día (96 columnas) lo reduce a USD 383/t, dentro del límite inferior del mercado voluntario. En segundo lugar se ubican el precio de energía y el OPEX general ($\pm$ USD 38/t ante $\pm$ 30%), seguidos por el CAPEX ($\pm$ USD 23/t ante $\pm$ 20%). El precio del sorbente tiene impacto menor ($\pm$ USD 10/t entre USD 10 y USD 30/kg).

Tabla 13: Sensibilidad del precio de equilibrio

Variable	Escenario bajo	Precio de equilibrio (USD/t)	Escenario alto	Precio de equilibrio (USD/t)	Δ (USD/t)
Escala producción	5 t/día	511	15 t/día	383	128
OPEX	-20%	363	+20%	488	125
Precio energía	-30%	388	+30%	463	75
Tasa descuento	3%	401	8%	468	67
CAPEX	-20%	403	+20%	449	45
Precio sorbente	USD 10/kg	416	USD 30/kg	435	19

La tabla completa de sensibilidad se incluye en el Anexo I.

Un resultado relevante del análisis de sensibilidad es que el precio del sorbente no constituye el factor dominante del costo de captura: una variación de USD 10/kg a USD 30/kg modifica el precio de equilibrio en solo USD 19/tCO₂ (4,5% del valor base). Los factores de mayor impacto son la escala de producción y el costo de la energía térmica.

La viabilidad del proyecto es robusta en el rango de 10–15 tCO₂/día con precios de CO₂ superiores a USD 430/t, y sensible principalmente a la escala de producción. Condiciones favorables de energía renovable, como la disponibilidad de energía eólica a USD 0,03–0,04/kWh en la región de Magallanes, reducirían adicionalmente el punto de equilibrio en aproximadamente USD 38/t, mejorando la competitividad del proceso.

5.12.5 Alcance y limitaciones del análisis económico

El análisis corresponde a una estimación Clase 5 con incertidumbre típica de $\pm 50\%$. Las principales limitaciones son: (i) el precio del sorbente amínico (USD 20/kg) es una estimación de literatura sin cotización industrial; (ii) no se considera integración energética entre etapas del ciclo; (iii) el análisis OAT no captura interacciones entre variables de diseño; y (iv) los costos de columnas no incluyen factores de diseño para vacío parcial.

El análisis no incorpora instrumentos de política pública que podrían alterar la viabilidad financiera del proyecto. A modo de referencia, el crédito fiscal 45Q vigente en Estados Unidos (USD 180/tCO₂ para DAC) reduciría el precio de equilibrio efectivo a USD 246/tCO₂. También cabe destacar que, en el contexto chileno, la Ley de Cambio Climático

(Ley 21.455) establece el marco para instrumentos económicos de mitigación, aunque a la fecha no existe un subsidio directo comparable para captura de carbono.

Finalmente, los resultados deben interpretarse como orientadores de decisiones de diseño en etapa conceptual, no como proyección financiera definitiva.

5.13 Trabajo futuro

A partir de las limitaciones identificadas en este trabajo, se proponen las siguientes extensiones en orden de prioridad:

1. Cuantificación experimental de la energía de regeneración como función de la humedad relativa, para resolver el trade-off entre máxima capacidad de captura y mínimo costo energético identificado en la sección 5.9. El experimento consiste en correr ciclos VTSA completos a distintos niveles de HR (20%, 40%, 60%, 80%), midiendo CO₂ capturado y calor consumido en cada caso, para construir la curva GJ/tCO₂ vs HR y determinar el punto operacional de mínimo costo energético.
2. Diseño factorial 2² o 2³ (HR × T, eventualmente con velocidad) para capturar interacciones entre variables y determinar condiciones óptimas de operación para localidades específicas de Chile.
3. Validación experimental del ciclo VTSA completo en columna de laboratorio, con medición directa de tiempo de ruptura, perfiles axiales de temperatura durante desorción, concentración de CO₂ en efluente por etapa y capacidad cíclica bajo al menos tres niveles de humedad relativa. La validación actual del modelo cubre únicamente la curva de breakthrough en adsorción; las siete etapas de regeneración no han sido validadas experimentalmente.

4. Extensión a modelo 2D o incorporación de factor de eficiencia de pared, para evaluar la pérdida de capacidad por gradientes radiales y canalización en columnas industriales con $L/D \approx 1$. En sistemas reales con partículas de geometría irregular como el APDES-NFC liofilizado, el empaquetamiento no homogéneo genera zonas de mayor porosidad local que producen distribución no uniforme del flujo, ruptura más temprana y menor capacidad cíclica efectiva que la predicha por el modelo 1D.
5. Modelo de degradación del sorbente como función del número de ciclos $f(N)$, distinguiendo dos mecanismos: (i) formación de urea por reacción entre grupos amino y CO_2 en condiciones secas a alta temperatura, que reduce irreversiblemente los sitios activos; y (ii) oxidación de grupos amino primarios por O_2 del aire ambiente, mecanismo dominante en operación continua con aire sin pretratamiento. La incorporación de una curva de decaimiento de capacidad calibrada experimentalmente permitiría estimar el impacto sobre el OPEX por reposición de sorbente a 5 y 10 años de operación.
6. Acoplamiento dinámico del sistema térmico con perfiles horarios de generación renovable (solar o eólica) para evaluar la fracción de operación con energía 100% limpia.

6. CONCLUSIONES

Se evaluó la viabilidad técnica y económica de un sistema DAC basado en el ciclo de Adsorción por Oscilación de Vacío y Temperatura (VTSA) con sorbente amínico sobre celulosa nanofibrilada, mediante simulación dinámica a escala laboratorio e industrial.

Se desarrolló e implementó un modelo dinámico unidimensional con balances acoplados de masa y energía, isothermas multicomponente $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ (Toth y GAB) y las ocho etapas del ciclo VTSA, validado mediante balance de masa con residual inferior al 2%. Los resultados constituyen una cota superior del desempeño real al no incorporar degradación del sorbente, gradientes radiales ni canalización de flujo.

Se determinaron los indicadores operacionales clave del sistema. La capacidad cíclica converge a 0,880 mmol/g (segundo ciclo), con factor de utilización del 74% y tiempo de ciclo de 384 minutos. La configuración mínima para operación continua requiere 3 lechos en paralelo con desfase de 82 minutos. El análisis paramétrico OAT identificó la humedad relativa como la variable de mayor impacto sobre la capacidad cíclica (35% de variación en el rango evaluado), con máximo a 60% HR, alineado con el mecanismo de bicarbonato del sorbente amínico. La condición de máxima capacidad no coincide con la de mínimo costo energético de regeneración.

Se estimaron los requerimientos energéticos correspondientes a 14,17 GJ/tCO₂ en energía térmica y 1.753 kWh/tCO₂ en requerimientos eléctricos, y se realizó una evaluación económica para una planta piloto mediana de 66 columnas de adsorción de ~10 tCO₂/día, escala que surge de dividir la producción objetivo por la capacidad de cada módulo industrial simulado (158,7 kg CO₂/día/columna), resultando en 66 columnas. El CAPEX asciende a USD 8,1 M y el costo de captura a USD 312/tCO₂. El precio de equilibrio financiero se estimó en USD 426/tCO₂, valor dentro del rango del mercado voluntario de carbono actual (USD 400–1.000/tCO₂), confirmando la viabilidad económica del proceso a esta escala.

REFERENCIAS

- Abdullatif, Y., Sodiq, A., Mir, N., Bicer, Y., Al-Ansari, T., El-Naas, M. H. & Amhamed, A. (2023). Emerging trends in direct air capture of CO_2 : a review of technology options targeting net-zero emissions. *RSC Advances*, 13(9), 5687–5722. <https://doi.org/10.1039/D2RA07940B>
- Arguello-Pérez, J. (2022). Energías renovables, reducción de costos en aerogeneradores y paneles solares. *Visión electrónica*, 16(2), 236–243. <https://revistas.udistrital.edu.co/index.php/visele/article/view/17686>
- Bui, M., Adjiman, C., Bardow, A., Anthony, E., Boston, A., Brown, S., Fennell, P., Fuss, S., Galindo, A., Hackett, L., Hallett, J., Herzog, H., Jackson, G., Kemper, J., Krevor, S., Maitland, G., Matuszewski, M., Metcalfe, I., Petit, C.,... Mac-Dowell, N. (2018). Carbon capture and storage (CCS): the way forward. *Energy & Environmental Science*, 11(5), 1062–1176. <https://doi.org/10.1039/C7EE02342A>
- Chen, S., Xie, R., Shi, W., Wang, R., Zhang, X., Wang, T., Palma, C. & Jiang, L. (2025). Scale-up strategies for adsorption-based reactors with efficient direct air capture. *Device, a cell press journal*, 3(3), 100614. <https://doi.org/10.1016/j.device.2024.100614>
- Choi, S., Drese, J. H., & Jones, C. W. (2009). "Adsorbent materials for carbon dioxide capture from large anthropogenic point sources." *ChemSusChem*, 2(9), 796–854.
- Climeworks (2026). *Direct air capture technology*. Climeworks. Recuperado el día 20 de enero de 2026 disponible en: <https://climeworks.com/direct-air-capture>

- Deschamps, T., Kanniche, M., Grandjean, L., & Authier, O. (2022). Modeling of Vacuum Temperature Swing Adsorption for Direct Air Capture Using Aspen Adsorption. *Clean Technologies*, 4(2), 258–275. <https://doi.org/10.3390/cleantechnol4020015>
- Do, D.D. (1998). Adsorption Analysis: Equilibria and Kinetics. Imperial College Press, London.
- Environmental Protection Agency (2024). *Global greenhouse gas overview*. EPA. <https://www.epa.gov/ghgemissions/global-greenhouse-gas-overview>
- Fasihi, M., Efimova, O., & Breyer, C. (2019). Techno-economic assessment of CO₂ direct air capture plants. *Journal of Cleaner Production*, 224, 957–980. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2019.03.086>
- Friedlingstein, P., O’Sullivan, M., Jones, M., Andrew, R., Bakker, D., Hauck, J., Landschützer, P., Le Quéré, C., Luijkx, I., Peters, G., Peters, W., Pongratz, J., Schwingshackl, C., Sitch, S., Canadell, J., Ciais, P., Jackson, R., Alin, S., Anthoni, P., ... Zheng, B. (2023). Global Carbon Budget 2023. *Earth System Science Data*, 15(12), 5301–5369. <https://doi.org/10.5194/essd-15-5301-2023>
- Gobierno de Chile (2021). *Estrategia climática de largo plazo de Chile. Camino a la carbono neutralidad y resiliencia a más tardar al 2050*. <https://cambioclimatico.mma.gob.cl/wp-content/uploads/2021/11/ECLP-LIVIANO.pdf>
- Gutiérrez-Olguín, P. (2020). El incremento del CO₂ en el planeta, como evidencia de las actividades humanas. *Logos Boletín Científico De La Escuela Preparatoria No. 2*, 7(13), 3–4. <https://repository.uaeh.edu.mx/revistas/index.php/prepa2/article/view/5156>

- Hansen, J., Ruedy, R., Sato, M. & Lo, K. (2010). Global surface temperature change. *Reviews of Geophysics*, 48(4),
<https://repository.uaeh.edu.mx/revistas/index.php/prepa2/article/view/5156>
- House, K., Baclig, A., Ranjan, M., van Nierop, E., Wilcox, J., & Herzog, H. (2011). Economic and energetic analysis of capturing CO_2 from ambient air. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 108(51), 20428–20433. <https://doi.org/10.1073/pnas.1012253108>
- Intergovernmental Panel on Climate Change [IPCC] (2021). *Climate Change 2021. The Physical Science Basis*. Cambridge University Press.
<https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg1/>
- Intergovernmental Panel on Climate Change [IPCC] (2023). *Climate change 2023: Synthesis report. Contribution of working groups I, II and III to the sixth assessment report of the intergovernmental panel on climate change* [Core Writing Team, H. Lee and J. Romero (eds.)]. IPCC.
https://www.ipcc.ch/report/ar6/syr/downloads/report/IPCC_AR6_SYR_FullVolume.pdf
- International Energy Agency [IEA] (11 de mayo de 2023). *Unlocking the potential of direct air capture: Is scaling up through carbon markets possible?* IEA. Recupero el día 15 de septiembre de 2025 disponible en <https://www.iea.org/commentaries/unlocking-the-potential-of-direct-air-capture-is-scaling-up-through-carbon-markets-possible>
- Keith, D., Holmes, G., Angelo, D. & Heidel, K. (2018). A Process for Capturing CO_2 from the Atmosphere. *Joule*, 2(8), 1573–1594. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2018.05.006>

- Li, G., Cheng, L., Zhu, J., Trenberth, K., Mann, M. & Abraham, J. (2020). Increasing ocean stratification over the past half-century. *Nature Climate Change*, 10(12), 1116–1123. <https://doi.org/10.1038/s41558-020-00918-2>
- Lindsey, R. (14 de enero de 2009). *Climate and Earth's Energy Budget*. NASA. <https://science.nasa.gov/earth/earth-observatory/climate-and-earths-energy-budget/>
- Loeb, N., Johnson, G., Thorsen, T., Lyman, J., Rose, F. & Kato, S. (2021). Satellite and Ocean Data Reveal Marked Increase in Earth's Heating Rate. *Geophysical Research Letters*, 48(13). <https://doi.org/10.1029/2021GL093047>
- MacCracken, M. (2001). Global Warming: A Science Overview. En Kursunoglu, B., Mintz, S. & Perlmutter, A (Eds). *Global Warming and Energy Policy* (pp. 151–159). Springer. https://doi.org/10.1007/978-1-4615-1323-0_11
- Machin-Morera, I., Pérez-Orta, L. & Martínez, S. (2023). Una visión termodinámica para explicar la correlación entre el incremento de la temperatura global de la tierra con la concentración de CO_2 en la atmósfera. *Av. cien. ing.*: 14 (3), 89-100. <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=9650784>
- Mantulet, G., Bidaud, A. & Mima, S. (2020). The role of biomass gasification and methanisation in the decarbonisation strategies. *Energy*, 193, 116737. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116737>
- McQueen, N., Gomes, K., McCormick, C., Blumanthal, K., Pisciotta, M., & Wilcox, J. (2021). A review of direct air capture (DAC): scaling up commercial technologies and innovating for the future. *Progress in Energy*, 3(3), 032001. <https://doi.org/10.1088/2516-1083/abf1ce>

- Mena, A. (2024). *Conversión termo-fotocatalítica de CO₂ utilizando nanocompuestos de In₂O₃-TiO₂* [Tesis de Maestría-Centro de investigación científica y de educación superior de Ensenada, Baja California]. CICESE Repositorio. <https://cicese.repositorioinstitucional.mx/jspui/handle/1007/4155>
- Millar, R., Fuglestvedt, J., Friedlingstein, P., Rogelj, J., Grubb, M., Matthews, H., Skeie, R., Forster, P., Frame, D., & Allen, M. (2017). Emission budgets and pathways consistent with limiting warming to 1.5 °C. *Nature Geoscience*, 10, 741–747. <https://doi.org/10.1038/ngeo3031>
- Peters, M. S., Timmerhaus, K. D., & West, R. E. (2002). *Plant design and economics for chemical engineers* (5th ed.). McGraw-Hill Professional.
- Queijo, A. (2017). *Sistemas de captura de CO₂* [Tesis de Maestría-Universidad da Coruña]. RUC: Repositorio de la Universidad da Coruña. <https://ruc.udc.es/entities/publication/e97e45fe-376e-46fa-bb3f-eabb6ec7b74a>
- Realmonde, G., Drouet, L., Gambhir, A., Glynn, J., Hawkes, A., Köberle, A., & Tavoni, M. (2019). An inter-model assessment of the role of direct air capture in deep mitigation pathways. *Nature Communications*, 10, 3277. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10842-5>
- Rengifo, Y. (2022). Sistema meteorológico: temperatura y humedad relativa y concentración de CO₂. *Revista Bioetnia*, 19(1), 42–52. <https://doi.org/10.51641/bioetnia.v19i1.268>
- Romero, H., Robles, M. & Sarricolea, P. (2024). Geografía física crítica del extractivismo y la gentrificación climática en Chile. *Geo UERJ*, 46, <https://doi.org/10.12957/geouerj.2024.87699>

- Ruthven, D.M. (1984). *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. John Wiley & Sons, New York.
- Sanz-Pérez, E., Murdock, C., Didas, S., & Jones, C. (2016). Direct Capture of CO₂ from Ambient Air. *Chemical Reviews*, 116(19), 11840–11876. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00173>
- Shi, X., Xiao, H., Azarabadi, H., Song, J., Wu, X., Chen, X., & Lackner, K. (2020). Sorbents for the Direct Capture of CO₂ from Ambient Air. *Angewandte Chemie International Edition*, 59(18), 6984–7006. <https://doi.org/10.1002/anie.201906756>
- Sriram, A., Brabson, L., Yu, X., Choi, S., Abdelmaqsoud, K., Moubarak, E., de Haan, P., Löwe, S., Brehmer, J., Kitchin, J., Welling, M., Zitnick, C., Ulissi, Z., Medford, A., & Sholl, D. (2025). *The Open DAC 2025 Dataset for Sorbent Discovery in Direct Air Capture*. ArxivLabs. <https://arxiv.org/abs/2508.03162>
- Stampi-Bombelli, V., van der Spek, M., & Mazzotti, M. (2020). Analysis of direct capture of CO₂ from ambient air via steam-assisted temperature–vacuum swing adsorption. *Adsorption*, 26(7), 1183–1197. <https://doi.org/10.1007/s10450-020-00249-w>
- Sumida, K., Rogow, D. L., Mason, J. A., McDonald, T. M., Bloch, E. D., Herm, Z. R., Bae, T.-H., & Long, J. R. (2012). Carbon dioxide capture in metal–organic frameworks. *Chemical Reviews*, 112(2), 724–781.
- Trenberth, K., & Fasullo, J. (2009). Changes in the flow of energy through the Earth’s climate system. *Meteorologische Zeitschrift*, 18(4), 369–377. <https://doi.org/10.1127/0941-2948/2009/0388>

United Nations Framework Convention on Climate Change [UNFCCC] (2015). *Paris Agreement* *Spanish.*

https://unfccc.int/sites/default/files/spanish_paris_agreement.pdf

VectorMine. (s.f.). *Captura directa del aire y filtrado de CO₂ para reducir la contaminación*

[Imagen]. Dreamstime. Recuperado el día 20 de enero de 2026 de

<https://es.dreamstime.com/captura-directa-del-aire-y-filtrado-de-co-para-reducir-el-diagrama-esquema-contaminaci%C3%B3n-separaci%C3%B3n-di%C3%B3xido-carbono-educativo-image236891932>

Viebahn, P., Scholz, A., & Zelt, O. (2019). The Potential Role of Direct Air Capture in the German Energy Research Program—Results of a Multi-Dimensional Analysis. *Energies*, 12(18), 3443. <https://doi.org/10.3390/en12183443>

World Resources Institute (WRI). (s.f.). *CarbonShot: Direct Air Capture*. Recuperado de: https://carbon180.org/wpcontent/uploads/2024/02/Carbon180DeepdiveDACESP.pdf?futm_source=chatgpt.com

Wurzbacher, J., Gebald, C., Piatkowski, N., & Steinfeld, A. (2012). Concurrent Separation of CO₂ and H₂O from Air by a Temperature-Vacuum Swing Adsorption/Desorption Cycle. *Environmental Science & Technology*, 46(16), 9191–9198. <https://doi.org/10.1021/es301953k>

Zanna, L., Khatiwala, S., Gregory, J., Ison, J., & Heimbach, P. (2019). Global reconstruction of historical ocean heat storage and transport. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 116(4), 1126–1131. <https://doi.org/10.1073/pnas.1808838115>

Zhu, X., Xie, W., Wu, J., Miao, Y., Xiang, C., Chen, C., Ge, B., Gan, Z., Yang, F., Zhang, M., O'Hare, D., Li, J., Ge, T., & Wang, R. (2022). Recent advances in direct air

capture by adsorption. *Chemical Society Reviews*, 51(15), 6574–6651.

<https://doi.org/10.1039/D1CS00970B>

ANEXOS

Anexo A: Balances asociados al consumo energético del proceso de adsorción.

A continuación, se detalla la ecuación de Ergun es utilizada para calcular la caída de presión en un lecho fijo, considerando tanto el régimen de flujo laminar como el turbulento. En el marco del modelo TVSA, esta ecuación permite determinar la resistencia que presenta el lecho al paso del gas, facilitando el diseño y la evaluación del sistema de adsorción. La caída de presión dentro del lecho es compensada mediante un ventilador eléctrico W_F y una bomba de vacío W_{VP} lo que asegura el funcionamiento eficiente del proceso. La ecuación combina los principios de Karman-Kozeny para flujos laminares y Burke-Plummer para flujos turbulentos, incorporando parámetros como la forma de las partículas ψ , el radio de las partículas r_p , la fracción de vacío ε_i , y las propiedades del gas, como la viscosidad dinámica μ , la velocidad del gas v_g y su peso molecular PM (Deschamps et al., 2022).

$$\frac{\partial P}{\partial z} = - \left(\frac{150(1 - \varepsilon_i)^2}{(2r_p\Psi)^2 \varepsilon_i^3} \mu_g v_g + 1,75PM\rho_g \frac{(1 - \varepsilon_i)}{2r_p\Psi \varepsilon_i^3} u_g^2 \right) \quad (18)$$

Anexo B: Ecuación del Balance de Materia Global

La metodología propuesta para este trabajo se basa en la modelación del proceso de adsorción en un lecho fijo utilizando. Este modelo considera balances de materia y energía para describir los fenómenos de transporte y transferencia de calor asociados con la adsorción de CO₂ en un material adsorbente bajo diferentes condiciones operativas. A continuación, se detallan los aspectos fundamentales de la metodología, acompañados de las ecuaciones que rigen los fenómenos involucrados (Deschamps et al., 2022).

Balance de Materia Global:

$$-\epsilon_i \cdot \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} + \frac{\partial(u_g \cdot C_k)}{\partial z} + \epsilon_B \frac{\partial C_k}{\partial t} + J_k = 0 \quad (19)$$

Término por difusión axial

$$-\epsilon_i \cdot \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \quad (20)$$

Este término considera la difusión del componente k en la dirección axial del lecho, influenciada por gradientes de concentración. El coeficiente de difusión efectivo (D_{eff}) se calcula utilizando la siguiente relación:

$$\frac{1}{D_{eff}} = \frac{1}{D_{AB}} + \frac{1}{D_K} \quad (21)$$

Donde D_{AB} es la difusividad molecular y D_K es el coeficiente de difusión de Knudsen, definido como:

$$D_K = 9,7 \cdot 10^3 \cdot r_p \cdot \left(\frac{T}{PM_A} \right)^{0,5} \quad (22)$$

Aquí, r_p es el radio promedio de los poros en [cm], T la temperatura absoluta, P la presión y PM el peso molecular del componente A.

Término por convección dentro del gas:

Este término describe el transporte convectivo del componente k debido al flujo del gas a lo largo del lecho.

$$\frac{\partial(u_g \cdot C_k)}{\partial z} \quad (23)$$

Término de acumulación en el sólido

$$J_K = -\rho_s \cdot \frac{\partial Ads}{\partial t} \quad (24)$$

Término de acumulación en el gas

Representa el cambio temporal de la concentración de k en la fase gaseosa.

$$\epsilon_B \frac{\partial C_k}{\partial t} \quad (25)$$

La transferencia de masa hacia el adsorbente se modela considerando la cinética de adsorción, que sigue la ecuación:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = k \cdot (q_i - q_i^*) \quad (26)$$

Aquí, k es la constante de velocidad de adsorción, q son las capacidades de adsorción en equilibrio y en el tiempo t.

Anexo C: Balance de Energía en el sólido

El balance de energía asociado al sólido describe la transferencia de calor en el adsorbente, considerando los efectos de convección entre las fases sólida y gaseosa, el calor liberado durante la adsorción, y la acumulación térmica en el sólido (Deschamps et al., 2022).

Este balance se expresa como:

$$-hgs \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} + C_p \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} + \sum_k H_k + \rho_s \sum_k H_k \frac{\partial q_i}{\partial t} - HTC a_p (T_g - T_s) = 0 \quad (27)$$

Cálculo porosidades

$$\varepsilon_T = \varepsilon_B + (1 - \varepsilon_B) \varepsilon_p \quad (28)$$

$$V_p = \frac{V_b - V_s}{V_b} \quad (29)$$

$$a_s = \frac{A_p (1 - \varepsilon_B)}{V_b} \quad (30)$$

Difusión térmica del sólido.

Considera la transferencia de calor en la dirección axial dentro del sólido debido a gradientes de temperatura.

$$-hgs \cdot \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} \quad (31)$$

Acumulación de calor en el sólido

Representa el almacenamiento de energía térmica en el sólido a lo largo del tiempo.

$$C_p \cdot \rho_s \cdot \frac{\partial T_s}{\partial t} \quad (32)$$

Término de calor acumulado en la fase adsorbida

$$\sum_k H_k \quad (33)$$

Contribución del calor de adsorción

Incluye el calor liberado durante la adsorción de los diferentes componentes i.

$$\rho_s \sum_k H_k \frac{\partial q_i}{\partial t} \quad (34)$$

Intercambio de calor entre gas y sólido

Describe el flujo de calor entre las fases gaseosa y sólida debido a la diferencia de temperaturas.

$$HTC \cdot a_p \cdot (T_g - T_s) \quad (35)$$

Anexo D: Balance de Energía en la Fase Gas

El balance de energía en la fase gaseosa está dado por (Deschamps et al., 2022):

$$-\epsilon_B \cdot \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2} + C_p \cdot u_g \cdot \rho_g \cdot \frac{\partial T_g}{\partial z} + \epsilon_B \frac{\partial T_g}{\partial t} + P \frac{\partial u_g}{\partial z} + \Delta H + HTC \cdot a_p \cdot (T_s - T_g) = 0 \quad (36)$$

Término por difusión axial

Describe la transferencia de calor a lo largo del lecho debido a gradientes de temperatura.

$$-\epsilon_B \cdot \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2} \quad (37)$$

Término por convección dentro del gas

Representa la transferencia de calor asociada al flujo de gas en la dirección axial.

$$C_p \cdot u_g \cdot \rho_g \cdot \frac{\partial T_g}{\partial z} \quad (38)$$

Término de acumulación en el sólido

$$P \frac{\partial u_g}{\partial z} \quad (39)$$

Término de acumulación en el gas.

$$\epsilon_B \frac{\partial T_g}{\partial t} \quad (40)$$

Término de generación de calor:

$$\Delta H \quad (41)$$

Intercambio de calor entre gas y sólido

Describe el flujo de calor entre las fases gaseosa y sólida debido a la diferencia de temperaturas.

$$HTC \cdot a_p \cdot (T_s - T_g) \quad (42)$$

Anexo E: Modelo dinámico ode15s

El modelo dinámico desarrollado para la simulación del proceso de captura directa de CO₂ mediante adsorción se basa en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) acopladas que representan balances de masa, energía y transferencia de materia en fase gas-sólido. Este tipo de formulación presenta características típicas de sistemas rígidos (stiff), debido a la coexistencia de fenómenos que operan en distintas escalas temporales.

En particular, el sistema incluye:

1. Fenómenos rápidos: cinética de adsorción, transferencia de masa intraparticular
2. Fenómenos lentos: dinámica térmica del lecho, evolución de concentraciones a lo largo del ciclo
3. Fuertes no linealidades: isothermas de adsorción, dependencia con temperatura
4. Posibles discontinuidades: cambios de etapa en ciclos tipo TSA/VTSA

Esta combinación genera un sistema donde algunos estados cambian muy rápido y otros muy lento, lo que provoca inestabilidad numérica si se utilizan métodos explícitos convencionales.

En este contexto, se selecciona el solver ode15s de MATLAB, el cual está diseñado específicamente para resolver sistemas de EDO rígidos mediante métodos implícitos basados en fórmulas de diferenciación hacia atrás (BDF).

Las principales razones para su uso son:

- a) Alta estabilidad numérica frente a rigidez
- b) Capacidad de utilizar pasos de tiempo adaptativos
- c) Manejo eficiente de sistemas no lineales acoplados
- d) Robustez frente a problemas con múltiples escalas temporales

En consecuencia, ode15s permite resolver el sistema de manera estable y computacionalmente eficiente, evitando la necesidad de pasos de integración extremadamente pequeños.

Tabla 14. Comparación de métodos de integración de EDO

Solver	Tipo de método	Aplicabilidad general	Limitación en este caso
ode45	Runge-Kutta explícito	Problemas no rígidos	Inestable para sistemas rígidos, requiere pasos muy pequeños
ode23	Runge-Kutta explícito	Problemas simples/no rígidos	Baja precisión y eficiencia en sistemas complejos
ode113	Adams-Bashforth- Moulton	Problemas suaves/no rígidos	Pierde eficiencia en presencia de rigidez
ode15s	Implícito (BDF)	Sistemas rígidos	Adecuado para este caso
ode23s	Implícito (Rosenbrock)	Sistemas moderadamente rígidos	Menor robustez en sistemas altamente no lineales
ode23t	Método trapezoidal	Problemas moderadamente rígidos	Puede presentar oscilaciones numéricas
ode23tb	Implícito (TR- BDF2)	Sistemas rígidos	Menor flexibilidad que ode15s en problemas grandes

Anexo F: Estructura modular del modelo

El código se organizó en una estructura jerárquica y modular, lo que no solo facilita su comprensión, sino también su validación y futura ampliación. Cada módulo correspondió a una etapa funcional del proceso de simulación, en la que se asegura la trazabilidad de las variables y la coherencia de las unidades empleadas. De este modo, el código se compuso por cinco módulos que facilitaron su operación.

En primer lugar, se consolidó el módulo de parámetros y propiedades termofísicas. En este bloque inicial se definieron las constantes geométricas, físicas y termodinámicas del sistema. De acuerdo con Deschamps et al. (2022), las propiedades del gas se asumieron como dependientes de la temperatura, mientras que las propiedades del sólido se consideraron constantes dentro del rango operativo (293–383 K).

En segundo lugar, se constituyó el módulo de isothermas y cinética. En este segundo bloque se implementaron las ecuaciones de equilibrio Toth (CO_2) y GAB (H_2O), junto con el factor de competencia $f(RH, P_{\text{CO}_2})$. Este módulo permitió calcular las cargas de equilibrio q_i^* , a su vez que actualizaba la cinética de adsorción a través del modelo LDF dual. La constante k_i se expresó como una función de la temperatura de acuerdo con la relación de Arrhenius $k_i = k_0 \exp(-E_a/RT)$, lo que permitió capturar la dependencia térmica de la difusión intraparticular.

En tercer lugar, se estableció el módulo de balances acoplados. En este tercer bloque se integraron las ecuaciones discretizadas de masa, energía y momentum en un sistema matricial resoluble por ODE15s. Por ello, en este módulo se evaluaron simultáneamente las

variaciones de y_i , T_g , T_s y P para cada nodo espacial, lo que asegura la conservación local de las magnitudes.

En cuarto lugar, se determinó el módulo de control de ciclo VTSA. En este penúltimo bloque se definieron las etapas operativas, a saber: adsorción, evacuación, precalentamiento, prepurga, desorción térmica, purga, enfriamiento y represurización, y sus duraciones características. Al respecto, cabe resaltar que las transiciones de temperatura y presión entre etapas se interpolaron de forma lineal en intervalos de 10s para evitar discontinuidades numéricas.

En quinto lugar, se conformó el módulo de postprocesamiento. Con este último bloque se pretendió calcular métricas de desempeño, tales como la capacidad de trabajo (Δq_{CO_2}), la energía térmica y eléctrica específica (E_{th} , E_{el}). De este modo, fue posible generar perfiles axiales y temporales tanto de concentración como de temperatura. En consecuencia, este módulo utilizó las variables obtenidas del integrador y las transformó en resultados gráficos y comparativos para la fase de análisis.

Anexo G: Inventario de equipos y estimación de indicadores económicos

Tabla 15: Inventario de equipos y estimación de CAPEX

Equipo	Descripción	N°	Especificación	Material	Costo unit. (USD)	Costo total (USD)
Columna de adsorción	Lecho empacado	66	D=1.80m, H=1.78m, V=4.53m ³	Acero al carbono	\$8.922	\$588.887
Sorbente amínico ¹	Amina func./celulosa nanofibrilada APDES-NFC (Gebald et al., 2011)	1	66.2 t @ USD 20/kg	—	\$1.324.947	\$1.324.947
Internos del lecho	Mallas, distribuidores, soportes	66	Acero inox/HDPE	Acero inox	\$1.200	\$79.200
Ventiladores industriales	Soplador centrífugo	3	Q=12 Nm ³ /s, 17 kW	Acero al carbono	\$10.183	\$30.549
Sistema térmico	Caldera + intercambiador	1	1.717 kW, vapor 120°C	Acero al carbono	\$1.573.929	\$1.573.929
Sistema de vacío	Bomba anillo líquido	2	14 kW total	Acero inox	\$8.637	\$17.273
Válvulas automatizadas	Válvulas proceso neumáticas	396	DN50, PN16	Acero al carbono	\$600	\$237.600
Manifold distribución aire	Colector + ramificaciones	3	D≈1m	Acero al carbono	\$50.000	\$150.000
Separador CO ₂ /H ₂ O	Flash + condensador	1	~435 kg/h CO ₂	Acero inox	\$200.000	\$200.000

¹ El precio unitario de USD 20/kg corresponde a una estimación de costo proyectado para producción industrial a escala, consistente con el rango reportado por Fasihi et al. (2019) para sorbentes amínicos sólidos (USD 10–50/kg). No representa un precio de mercado observable. A escala de laboratorio o piloto actual, el costo real es significativamente mayor. El costo del sorbente se identifica como variable de alta incertidumbre en el CAPEX.

Sistema de control DCS	PLC/DCS + instrumentación	1	66 lazos de control	—	\$350.000	\$350.000
Sistema eléctrico	MCC + cableado	1	—	—	\$200.000	\$200.000
Civil y estructura	Cimentaciones + metálica	1	~500 m ²	Hormigón/acero	\$600.000	\$600.000
TOTAL EQUIPOS						\$5.352.385

RESUMEN CAPEX

Categoría	Base	%	Monto (USD)	M USD
Equipos	Inventario	—	\$5.352.385	5,35
Instalación	15% equipos	15%	\$802.858	0,80
Operativo base	6% equipos	6%	\$321.143	0,32
Instrumentación	6% equipos	6%	\$321.143	0,32
Auxiliares	2% equipos	2%	\$107.048	0,11
Utilidades año 1	OPEX energético	—	\$1.192.617	1,19
CAPEX TOTAL			\$8.097.194	8,10

Anexo H: Flujo de caja proyectad al 2045 desde el 2026

Tabla 16: Flujo de caja proyectado 2026–2045

CAPEX (USD)	\$8.097.194
OPEX anual base (USD)	\$1.192.617
Precio CO ₂ (USD/t) ← EDITABLE	\$426
Producción (t/año)	3.822
Inflación	5,0%
Tasa descuento	5,0%
Tasa impositiva	27,0%
Valor residual	10,0%

Año	Ingresos	OPEX	Depreciación	Util. antes imp.	Impuestos	Flujo neto	FC acumulado	FC descontado
2026	\$1.628.172	\$1.192.617	\$404.860	\$30.695	\$8.288	-\$7.669.926	-\$7.669.926	-\$7.669.926
2027	\$1.709.581	\$1.252.248	\$404.860	\$52.473	\$14.168	\$443.165	-\$7.226.761	\$422.062
2028	\$1.795.060	\$1.314.860	\$404.860	\$75.340	\$20.342	\$459.858	-\$6.766.904	\$417.104
2029	\$1.884.813	\$1.380.603	\$404.860	\$99.350	\$26.824	\$477.385	-\$6.289.519	\$412.383
2030	\$1.979.053	\$1.449.633	\$404.860	\$124.560	\$33.631	\$495.789	-\$5.793.730	\$407.886
2031	\$2.078.006	\$1.522.115	\$404.860	\$151.031	\$40.778	\$515.112	-\$5.278.618	\$403.604
2032	\$2.181.906	\$1.598.221	\$404.860	\$178.826	\$48.283	\$535.402	-\$4.743.215	\$399.526
2033	\$2.291.002	\$1.678.132	\$404.860	\$208.010	\$56.163	\$556.707	-\$4.186.508	\$395.641
2034	\$2.405.552	\$1.762.038	\$404.860	\$238.653	\$64.436	\$579.077	-\$3.607.432	\$391.942
2035	\$2.525.829	\$1.850.140	\$404.860	\$270.829	\$73.124	\$602.565	-\$3.004.867	\$388.419
2036	\$2.652.121	\$1.942.647	\$404.860	\$304.614	\$82.246	\$627.228	-\$2.377.639	\$385.063
2037	\$2.784.727	\$2.039.780	\$404.860	\$340.087	\$91.824	\$653.123	-\$1.724.516	\$381.868
2038	\$2.923.963	\$2.141.769	\$404.860	\$377.335	\$101.880	\$680.314	-\$1.044.202	\$378.824

2039	\$3.070.161	\$2.248.857	\$404.860	\$416.444	\$112.440	\$708.864	-\$335.338	\$375.926
2040	\$3.223.669	\$2.361.300	\$404.860	\$457.509	\$123.528	\$738.842	\$403.503	\$373.165
2041	\$3.384.853	\$2.479.365	\$404.860	\$500.628	\$135.170	\$770.318	\$1.173.822	\$370.536
2042	\$3.554.095	\$2.603.333	\$404.860	\$545.902	\$147.394	\$803.368	\$1.977.190	\$368.032
2043	\$3.731.800	\$2.733.500	\$404.860	\$593.440	\$160.229	\$838.071	\$2.815.261	\$365.648
2044	\$3.918.390	\$2.870.175	\$404.860	\$643.355	\$173.706	\$874.509	\$3.689.770	\$363.377
2045	\$4.114.310	\$3.013.684	\$404.860	\$695.766	\$187.857	\$1.722.488	\$5.412.258	\$681.647

Indicador	Valor
VAN (USD)	\$12.727
Costo captura (USD/t)	\$312
Payback (años)	18,6
Ingresos año 1 (USD)	\$1.628.172

Anexo I: Análisis de sensibilidad

Tabla 17: Tabla de sensibilidad

Variable	Escenario bajo	Precio de equilibrio bajo (USD/t)	Caso base	Precio de equilibrio base (USD/t)	Escenario alto	Precio de equilibrio alto (USD/t)	Δ rango (USD/t)
Escala producción	5 t/día (33 col)	\$511	~10 t/día (66 col)	\$426	15 t/día (96 col)	\$383	\$128
Precio energía	-30%	\$388	Base	\$426	+30%	\$463	\$75
CAPEX	-20%	\$403	Base	\$426	+20%	\$449	\$45
Precio sorbente	USD 10/kg	\$416	USD 20/kg	\$426	USD 30/kg	\$435	\$19
OPEX	-20%	\$363	Base	\$426	+20%	\$488	\$125
Tasa descuento	3%	\$401	5%	\$426	8%	\$468	\$67