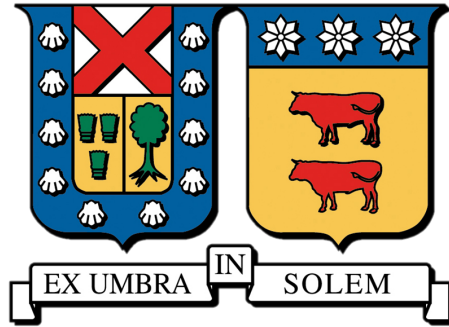


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL



EVALUACIÓN TÉCNICO ECONÓMICA DE LA
CAPTURA DIRECTA DE AIRE (DAC) DE CO₂
MEDIANTE ADSORCIÓN SÓLIDA:
LA APLICABILIDAD EN CHILE

MATÍAS SEBASTIÁN NÚÑEZ NAVARRETE

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL QUÍMICO

Guía: Dr. Gonzalo Núñez Montoya
Co-referente: Dr. Iván Cornejo García

JULIO, 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 técnico económica de la captura directa de aire (DAC) de CO₂ mediante adsorción sólida: la aplicabilidad en Chile

Nombre del candidato(a): Matías Sebastián Núñez Navarrete

Carrera / Grado: Ingeniería Civil Química

Campus: San Joaquín

Departamento: Ingeniería Química y Ambiental

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Gonzalo Alexis 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: 04/09/2026

Firma:

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 04/09/2026

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.

Resumen

El presente trabajo de título tiene como objetivo principal evaluar la viabilidad técnica y económica de implementar tecnologías de Captura Directa de Aire (DAC) en Chile, específicamente en la zona norte del país. En un contexto global de urgencia climática, donde la descarbonización profunda se vuelve imperativa, esta investigación busca determinar si las condiciones geográficas e industriales de Chile permiten que esta tecnología emergente sea una solución competitiva para la remoción de CO₂ atmosférico.

Para abordar esta problemática, se realiza un análisis comparativo entre las tecnologías de absorción líquida (L-DAC) y adsorción sólida (S-DAC), seleccionando esta última por su modularidad y menor demanda hídrica. Posteriormente, se desarrolla y valida un modelo fenomenológico unidimensional en MATLAB, capaz de simular la dinámica de adsorción y desorción en un lecho fijo utilizando sorbentes funcionalizados con aminas (Lewatit® VP OC 1065). El modelo simula un ciclo TVSA (*Temperature-Vacuum Swing Adsorption*) bajo condiciones climáticas de Mejillones. Luego, se realiza una estimación de costos (CAPEX y OPEX) y un escalamiento industrial hasta 1 Mt CO₂/año. Finalmente, se obtiene el Costo Nivelado de Captura (LCOD).

Los resultados obtenidos identifican a la tecnología S-DAC como la opción más idónea para el contexto nacional. A través de un análisis de sensibilidad, se define un “Escenario A” (Eficiencia Energética) como la configuración operativa óptima: con un vacío moderado de 0,7 bar y una temperatura de adsorción de 20°C, se logra minimizar el consumo específico de energía a 6,35 MJ/kg CO₂ y maximizar la productividad del sorbente. Por otro lado, se demuestra el impacto crítico de la economía de escala: el LCOD se reduce drásticamente desde valores superiores a 1.000 USD/tCO₂ en plantas piloto, hasta un rango competitivo de 541 USD/tCO₂ a escala industrial. El análisis financiero revela que el material sorbente es el componente más influyente, representando cerca del 83% de la inversión inicial en equipos directos.

Se concluye que la implementación de plantas DAC en el norte de Chile es técnicamente factible y presenta un potencial económico atractivo a largo plazo, especialmente si se aprovechan las sinergias con la industria local (calor residual) y la energía solar disponible. Si bien el costo actual es elevado, las proyecciones indican que la optimización de la vida útil del sorbente y la reducción de sus costos de fabricación son las claves para alcanzar la competitividad comercial.

Abstract

The main objective of this thesis is to evaluate the technical and economic feasibility of implementing Direct Air Capture (DAC) technologies in Chile, specifically in the northern region of the country. In a global context of climate urgency, where deep decarbonization becomes imperative, this research seeks to determine whether Chile's geographical and industrial conditions allow this emerging technology to be a competitive solution for the removal of atmospheric CO₂.

To address this issue, a comparative analysis is performed between liquid absorption (L-DAC) and solid adsorption (S-DAC) technologies, selecting the latter due to its modularity and lower water demand. Subsequently, a one-dimensional phenomenological model is developed and validated in MATLAB, capable of simulating the adsorption and desorption dynamics in a fixed bed using amine-functionalized sorbents (Lewatit® VP OC 1065). The model simulates a TVSA (*Temperature-Vacuum Swing Adsorption*) cycle under the climatic conditions of Mejillones. Then, a cost estimation (CAPEX and OPEX) and an industrial scale-up up to 1 Mt CO₂/year are performed. Finally, the Levelized Cost of Capture (LCOD) is obtained.

The obtained results identify the S-DAC technology as the most suitable option for the national context. Through a sensitivity analysis, "Scenario A" (Energy Efficiency) is defined as the optimal operating configuration: with a moderate vacuum of 0.7 bar and an adsorption temperature of 20°C, the specific energy consumption is minimized to 6.35 MJ/kg CO₂ and the sorbent productivity is maximized. On the other hand, the critical impact of economies of scale is demonstrated: the LCOD is drastically reduced from values above 1,000 USD/tCO₂ in pilot plants, to a competitive range of 541 USD/tCO₂ at an industrial scale. The financial analysis reveals that the sorbent material is the most influential component, representing nearly 83% of the initial investment in direct equipment.

It is concluded that the implementation of DAC plants in northern Chile is technically feasible and presents an attractive economic potential in the long term, especially if synergies with local industry (waste heat) and available solar energy are leveraged. Although the current cost is high, projections indicate that optimizing the sorbent's lifespan and reducing its manufacturing costs are key to achieving commercial competitiveness.

Agradecimientos

En primer lugar, a mi familia. Son un pilar fundamental de mi vida. A mi madre Verónica, por siempre haber estado a mi lado, apoyándome y acompañándome; gracias por tu paciencia, perseverancia y por haberme inculcado que la vida no es fácil, pero que dando lo mejor de nosotros mismos siempre saldremos adelante. Al fin y al cabo, todo pasa por algo. A mi hermano Ricardo, por su sabiduría y su actitud serena ante cualquier situación. Gracias por recibirme en Santiago, por ser una grata compañía todos estos años y por tomarse la vida con esa necesaria pizca de humor; fuiste tú quien me traspasó el gusto por la buena música y los videojuegos. A mi hermana Vanessa, por su cariño, por haber crecido conmigo y haber compartido tantas etapas. Soy feliz de tenerte como hermana y que seas parte de la familia. A mi padre: espero que, donde sea que estés, te sientas orgulloso de mí. Nunca te olvidaré. Descansa en paz.

Gracias a mi novia, Ignacia. Agradezco que la vida cruzara nuestros caminos en la universidad. Gracias por creer en mí incluso cuando yo mismo dudaba, por tu paciencia en los momentos de estrés y por iluminar mi vida con tu sonrisa. Por celebrar juntos cada logro. Somos un equipo, eres mi refugio y mi mejor amiga.

A mis amigos de la universidad, por las risas en cada trabajo y por el apañe mutuo para mantener la cordura en esta sufrida carrera. Estoy orgulloso de nuestra evolución y madurez; estoy seguro de que nos irá excelente a todos y espero que mantengamos este vínculo por siempre.

Agradezco sinceramente a mi profesor guía, Gonzalo Núñez, por su respeto, profesionalismo y buena onda. Gracias por su meticulosidad y organización, y por la dedicación en cada reunión, asegurándose de que nadie del grupo quedara atrás.

Un agradecimiento especial a mis gatos, Mirri y Mono, que llegaron a mi vida de manera inesperada. A pesar de mi alergia, no saben lo mucho que significan para mí. Gracias por sacarme una sonrisa con su ternura y permitirme despejar la mente de la rutina y el estrés.

Finalmente, en un plano más personal, la inspiración viene de muchas formas. Agradezco a Hidetaka Miyazaki, por enseñarme a través de la saga Souls que la perseverancia es la única llave ante la adversidad. Especialmente a su obra maestra y mi juego favorito, Bloodborne. Tras cada falla, siempre habrá una hoguera en la que poder descansar e intentarlo nuevamente. A la música que me ha acompañado en el proceso de este trabajo: Alice in Chains, Gojira, System of a Down,

Opeth, Dream Theater e incluso otros que se fueron sumando como Tame Impala, Mac de Marco y Djo. A mis superhéroes favoritos, que me han acompañado desde mi infancia y lo harán por el resto de mi vida: Spiderman, Batman y Superman, por recordarme que la verdadera fuerza reside en la voluntad de levantarse siempre una vez más. Cierro con una frase que aprendí de ellos y de Christopher Reeve: *“Un héroe es un individuo ordinario que encuentra la fuerza para perseverar y resistir a pesar de los obstáculos abrumadores.”*

Tabla de Contenidos

1	Introducción	1
2	Objetivos y Alcances	6
2.1	Objetivo General	6
2.2	Objetivos Específicos	6
2.3	Alcances	7
3	Estado del Arte	8
3.1	Aspectos generales de DAC	8
3.2	Clasificación de tecnologías DAC	12
3.2.1	Captura con solventes líquidos (L-DAC)	14
3.2.2	Captura con sorbentes sólidos (S-DAC)	15
3.2.3	Tecnologías emergentes	16
3.3	Comparativa tecno-económica	17
3.3.1	Consumo energético y eficiencia	17
3.3.2	Requerimientos de agua, terreno y materiales	17
3.3.3	Costos estimados (CAPEX y OPEX)	18
3.3.4	Nivel de madurez tecnológica y escalabilidad	19
3.3.5	Conclusión de la comparación	20
3.4	Aspectos técnicos de la captura por adsorción (S-DAC)	21
3.4.1	Modos de operación	21
3.4.2	Materiales usados como sorbente	25
3.4.3	Isotermas	28
3.5	Aplicabilidad geográfica y operativa en contextos internacionales	32
3.6	Investigación en curso en Chile sobre captura directa	34
3.7	Fundamentos Teóricos de la Adsorción en Lecho Fijo	35
3.7.1	Equilibrio de Adsorción: Isoterma de Toth	35

3.7.2	Cinética de Transferencia de Masa: Modelo Dual-Site	36
3.7.3	Dinámica Macroscópica de la Columna	37
4	Materiales y Métodos	38
4.1	Selección de tecnología DAC y zona geográfica	39
4.2	Modelación matemática en MATLAB	41
4.2.1	Supuestos	41
4.2.2	Ecuaciones y Resolución Numérica	41
4.3	Validación del modelo	43
4.3.1	Parámetros del Caso Base	43
4.3.2	Validación de la isoterma de adsorción	44
4.3.3	Validación de la curva de ruptura de adsorción	45
4.3.4	Validación de la curva de ruptura de desorción	46
4.4	Simulación de ciclo TVSA	48
4.4.1	Definición de Etapas del Ciclo	49
4.4.2	Balance de Energía y Estimación de Consumos	49
4.4.3	Indicadores Clave de Desempeño (KPIs)	50
4.4.4	Diseño del Análisis de Sensibilidad	51
4.5	Selección de escenarios y escalamiento	52
4.5.1	Estrategia de Definición de Escenarios	52
4.5.2	Definición del Módulo Industrial de Referencia	52
4.5.3	Metodología de Escalamiento	53
4.5.4	Supuestos del escalamiento laboratorio a industrial	54
4.6	Metodología económica	55
4.6.1	Estructura de Casos y Análisis de Incertidumbre	55
4.6.2	Estimación de Costos de Capital (CAPEX)	55
4.6.3	Estimación de Costos Operativos (OPEX)	57
4.6.4	Cálculo del Costo Nivelado (LCOD)	59
5	Resultados	60
5.1	Caso Base	60
5.1.1	Dinámica de la Adsorción	60
5.1.2	Dinámica de la Regeneración	61
5.1.3	Resumen de Indicadores de Desempeño (KPIs)	63
5.2	Análisis de Sensibilidad	64
5.2.1	Efecto de la Presión de Vacío	64
5.2.2	Efecto de la Temperatura de Adsorción	66

5.2.3	Efecto de la Temperatura de Desorción	68
5.2.4	Efecto del Tiempo de Adsorción	70
5.3	Definición de Escenarios	72
5.4	Escalamiento	74
5.5	Evaluación Económica	75
5.5.1	Costos de Capital (CAPEX)	76
5.5.2	Costos Operativos (OPEX)	79
5.5.3	Costo Nivelado de Captura (LCOD)	84
5.6	Modelo Empírico de Predicción de Costos	89
5.7	Análisis del impacto de la humedad relativa en una planta real	90
6	Conclusiones y Recomendaciones	92
6.1	Conclusiones	92
6.2	Recomendaciones	93
	Referencias	95
A	Deducción Fenomenológica de los Balances de Materia	I
A.1	Definición del Sistema y Volumen de Control	I
A.2	Balance de Masa en Fase Gaseosa	II
A.3	Balance de Masa en Fase Sólida	III
A.4	Formulación en Fracción Molar (Modelo de Petersen)	III
B	Detalle del Escalamiento Industrial	V
C	Resultados Económicos Detallados	VI

Lista de Tablas

3.1	Resumen de métodos terrestres de remoción de CO ₂ (IPCC, 2022)	10
3.2	Resumen de métodos oceánicos de remoción de CO ₂ (IPCC, 2022)	10
3.3	Comparación entre L-DAC y S-DAC (IEA, 2022).	21
4.1	Matriz de selección ponderada de zonas para simulación DAC.	40
4.2	Propiedades del sistema y condiciones de operación del Caso Base (Petersen et al., 2026).	43
4.3	Parámetros de la Isoterma de Toth utilizados en la simulación (Petersen et al., 2026).	44
4.4	Indicadores estadísticos de validación para las isotermas de adsorción de CO ₂	44
4.5	Comparación de parámetros cinéticos: Literatura vs. Ajuste del Modelo.	45
4.6	Variables de operación y rangos evaluados en el análisis de sensibilidad.	51
4.7	Características geométricas y físicas del módulo industrial base. Adaptado de Kim and Léonard (2022).	53
4.8	Desglose de factores económicos para la estimación de costos de inversión (Peters et al., 2003).	57
4.9	Parámetros y supuestos económicos para el cálculo del OPEX.	59
4.10	Factores de estimación para costos operativos indirectos y de manufactura (Peters et al., 2003).	59
5.1	Resumen de KPIs para el Caso Base.	63
5.2	Parámetros operativos seleccionados para los escenarios de evaluación económica.	73
5.3	Comparación de indicadores de desempeño (KPIs) para los escenarios evaluados.	73
5.4	Requerimientos físicos y energéticos para una planta de 1 Mt CO ₂ /año.	75
5.5	Desglose de la inversión para planta de 1 Mt CO ₂ /año (Costo Medio).	76
5.6	Desglose detallado de costos operativos anuales y unitarios (1 Mt CO ₂ /año, Costo Medio).	80
5.7	Resumen del LCOD para la planta de 1 Mt CO ₂ /año (Costo Medio).	85

5.8	Sensibilidad del LCOD frente a variaciones en la vida útil del sorbente (Escenario A, Costo Medio, Escala 1 Mt CO ₂ /año).	86
5.9	Sensibilidad del LCOD frente a variaciones en la tasa de descuento (Escenario A, Costo Medio, Escala 1 Mt CO ₂ /año)).	87
5.10	Comparación del LCOD calculado frente a precios de referencia y proyecciones internacionales.	89
B.1	Dimensionamiento físico y desglose de potencia para los tres escenarios.	V
C.1	Resumen de costos de capital, operación y nivelados para los 27 casos.	VII

Lista de Figuras

1.1	Concentración de CO ₂ atmosférico en el tiempo (Monroe, 2025).	1
1.2	Emisiones de CO ₂ anuales (Ritchie and Roser, 2024).	2
1.3	Emisiones de CO ₂ per cápita para diferentes países (Ritchie and Roser, 2024).	3
2.1	Esquema del proceso considerado.	7
3.1	Comparación entre CCS y DAC (Carbon Neutral+, 2025).	9
3.2	Plantas DAC y CCS alrededor del mundo (Ozkan et al., 2022).	12
3.3	Esquema de procesos genéricos de sorción y desorción DAC (Herzog, 2022).	13
3.4	Adsorción versus absorción (Zbair and Bennici, 2021).	13
3.5	Principales procesos y reacciones presentes en el proceso L-DAC utilizado por Carbon Engineering (Burhenne et al., 2017).	15
3.6	Diagrama de contactor L-DAC (Garza et al., 2023).	15
3.7	Funcionamiento de S-DAC (Climeworks, 2023).	16
3.8	Desglose de costos y comparativa entre S-DAC y L-DAC (Ozkan et al., 2022).	19
3.9	Tabla de las 3 principales compañías DAC y sus proyectos (Hunt, 2024).	20
3.10	Esquema de un sistema de captura de CO ₂ mediante PSA (Siqueira et al., 2017).	22
3.11	Diagrama de un sistema PVSA (Jiang et al., 2023).	23
3.12	Esquema de un sistema TSA (Jiang et al., 2018).	24
3.13	Diagrama de un sistema TVSA (Jiang et al., 2023).	25
3.14	Representación esquemática de la fisisorción y la quimisorción (Berger and Bhowan, 2011).	25
3.15	Sorbente Lewatit VP OC 1065 (LANXESS, 2024).	27
3.16	Distintos tipos de sorbentes sólidos para la captura de CO ₂ (Lai et al., 2021).	28
3.17	Tipos de isothermas de fisisorción (Sing, 1985).	29
3.18	Comportamiento de diferentes curvas de isothermas en caso monocomponente (Wood et al., 2018).	32

3.19	Regiones del mundo y su clasificación según temperatura y humedad relativa (Sendi et al., 2022b).	33
3.20	Rendimiento del proceso TVSA a diferentes temperaturas y humedades relativas (Sendi et al., 2022a).	34
3.21	Esquema de lecho empacado para adsorción de CO ₂ . Adaptado de Shafeeyan et al. (2014).	37
4.1	Diagrama de flujo metodológico secuencial que detalla las etapas de análisis técnico en MATLAB y la posterior evaluación económica.	38
4.2	Validación de la isoterma de adsorción de CO ₂ sobre Lewatit VP OC 1065 a distintas temperaturas.	45
4.3	Comparación entre la curva de ruptura experimental y la simulada.	46
4.4	Validación de la curva de desorción isotérmica a 30 °C.	48
5.1	Curva de ruptura durante la etapa de adsorción. La línea roja indica el tiempo de corte (t_{ads}) seleccionado para evitar la saturación completa y maximizar la eficiencia de captura.	61
5.2	Perfil de pureza de salida durante la regeneración.	62
5.3	Perfil de regeneración del material adsorbente.	63
5.4	Sensibilidad a la presión de vacío. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación total.	65
5.5	Sensibilidad a la presión de vacío. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.	65
5.6	Sensibilidad a la temperatura de adsorción. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación total.	67
5.7	Sensibilidad a la temperatura de adsorción. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.	67
5.8	Sensibilidad a la temperatura de desorción. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación total.	69
5.9	Sensibilidad a la temperatura de desorción. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.	69
5.10	Sensibilidad al criterio de ruptura. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación.	71
5.11	Sensibilidad al criterio de ruptura. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.	71

5.12	Distribución del costo directo de equipos para el Escenario B (Caso Base) a 1 Mt CO ₂ /año, costo medio. Se excluyen los costos indirectos para resaltar la proporción de los componentes tecnológicos.	77
5.13	Comparación de la distribución de costos de los equipos principales para los 9 casos a escala de 1 Mt CO ₂ /año.	78
5.14	Evolución del CAPEX anualizado en función de la capacidad de planta para los tres escenarios. Las barras verticales representan la sensibilidad a la incertidumbre de costos.	79
5.15	Distribución del costo operativo para el Escenario B a escala de 1 Mt CO ₂ /año a costo medio: Participación de los ítems principales en el OPEX total.	81
5.16	Distribución del costo operativo para el Escenario B a escala de 1 Mt CO ₂ /año a costo medio: Participación de los servicios en el OPEX puramente energético.	81
5.17	Comparación del OPEX anual a escala industrial (1 Mt) bajo distintos escenarios operativos y niveles de costos.	82
5.18	Desglose del costo energético unitario a escala industrial, costos medios.	83
5.19	Evolución del OPEX unitario en función de la escala para los tres escenarios. Las líneas verticales representan la sensibilidad a la incertidumbre de costos	84
5.20	Mapa de calor del LCOD para todos los casos evaluados. La intensidad del color refleja la magnitud del costo.	85
5.21	Composición del LCOD a escala industrial (1 Mt CO ₂ /año).	86
5.22	Evolución del LCOD en función de la capacidad de planta para los tres escenarios. Las barras verticales representan la sensibilidad a la incertidumbre de costos.	88
A.1	Volumen de control diferencial para el balance de masa en el lecho fijo.	I

Nomenclatura

Símbolo	Significado	Unidades
A	Área transversal del lecho	m^2
b	Constante de afinidad (Isoterma de Toth/Langmuir)	Pa^{-1}
b_0	Factor pre-exponencial de afinidad	Pa^{-1}
C	Concentración de CO_2 en fase gas	mol/m^3
C_{in}	Concentración de entrada de CO_2	mol/m^3
C_{out}	Concentración de salida de CO_2	mol/m^3
CRF	Factor de Recuperación de Capital	—
D_{ax}	Coefficiente de dispersión axial	m^2/s
d_p	Diámetro de la partícula de sorbente	m
E	Energía (eléctrica o térmica)	MJ o kWh
F_{target}	Capacidad objetivo de producción de planta	$\text{tCO}_2/\text{año}$
i	Tasa de descuento	%
k_{amine}	Constante cinética intrínseca de la amina	s^{-1}
k_1, k_2	Coefficientes de transferencia de masa (Modelo <i>Dual-Site</i>)	s^{-1}
L	Longitud del lecho	m
m_{sorb}	Masa de sorbente	kg
n	Vida útil de la planta	años
n_s	Capacidad máxima de saturación (Isoterma de Toth)	mol/kg
P	Presión total del sistema	Pa o bar
P_{vac}	Presión de vacío	Pa o bar
p_{CO_2}	Presión parcial de CO_2	Pa
Pr	Productividad del sorbente	$\text{kg CO}_2/\text{kg}_{sorb} \cdot \text{día}$
Q_{th}	Energía térmica requerida por ciclo	J o MJ
q	Carga adsorbida (concentración en fase sólida)	mol/kg
q^*	Carga adsorbida en equilibrio	mol/kg
R	Constante universal de los gases	$\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$

Continúa en la siguiente página ...

... viene de la página anterior

Símbolo	Significado	Unidades
Rec	Recuperación de CO ₂	%
r_b	Radio interno de la columna	m
r_p	Radio de la partícula de sorbente	m
SEC	Consumo específico de energía	MJ/kgCO ₂
T	Temperatura	°C
T_{ads}	Temperatura de adsorción	°C
T_{des}	Temperatura de desorción	°C
t	Tiempo	s (o h)
u_g	Velocidad superficial del gas	m/s
W_{fan}	Trabajo de ventiladores	J o kWh
W_{vac}	Trabajo de bombas de vacío	J o kWh
y_{CO_2}	Fracción molar de CO ₂ en fase gas	—
z	Coordenada axial en la columna	m
α	Coefficiente térmico del parámetro t (Toth)	—
ΔH_{ads}	Calor de adsorción isostérico	J/mol
ϵ	Porosidad del lecho (interpartícula)	—
ϵ_b	Porosidad del lecho (fracción de vacío interpartícula)	—
ϵ_p	Porosidad de la partícula (intrapartícula)	—
η	Fracción de sitios rápidos (Modelo <i>Dual-Site</i>)	—
ρ_b	Densidad global del lecho (bulk)	kg/m ³
ρ_p	Densidad de la partícula	kg/m ³
τ	Tortuosidad	—
χ	Parámetro térmico para n_s (Toth)	—

Siglas	Significado
ANID	Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo
BECCS	Bioenergía con Captura y Almacenamiento de Carbono (<i>Bioenergy with CCS</i>)
CAPEX	Gastos de Capital (<i>Capital Expenditure</i>)
CCS	Captura y Almacenamiento de Carbono (<i>Carbon Capture and Storage</i>)
CCU	Captura y Utilización de Carbono (<i>Carbon Capture and Utilization</i>)
CDR	Remoción de Dióxido de Carbono (<i>Carbon Dioxide Removal</i>)
CF	Factor de Capacidad (<i>Capacity Factor</i>)
CSS	Estado Estacionario Cíclico (<i>Cyclic Steady State</i>)

Continúa en la siguiente página ...

... viene de la página anterior

Siglas	Significado
DAC	Captura Directa de Aire (<i>Direct Air Capture</i>)
DACCS	Captura Directa de Aire con Almacenamiento de Carbono (<i>DAC with Storage</i>)
ESA	Adsorción por Cambio Eléctrico (<i>Electric Swing Adsorption</i>)
GEI	Gases de Efecto Invernadero
IEA	Agencia Internacional de Energía (<i>International Energy Agency</i>)
IPCC	Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático
KPI	Indicador Clave de Desempeño (<i>Key Performance Indicator</i>)
L-DAC	Captura Directa de Aire mediante absorción líquida
LCOD	Costo Nivelado de Captura (<i>Levelized Cost of Capture</i>)
MOF	Marcos Metal-Orgánicos (<i>Metal-Organic Frameworks</i>)
MSA	Adsorción por Cambio de Humedad (<i>Moisture Swing Adsorption</i>)
OPEX	Gastos Operativos (<i>Operational Expenditures</i>)
PEI	Polietilenimina (tipo de amina usada en sorbentes)
PSA	Adsorción por Cambio de Presión (<i>Pressure Swing Adsorption</i>)
PVSA	Adsorción por Cambio de Presión y Vacío (<i>PVSA</i>)
S-DAC	Captura Directa de Aire mediante adsorción sólida
S-TVSA	Adsorción por Cambio de Temperatura y Vacío asistida por Vapor
SEC	Consumo Específico de Energía (<i>Specific Energy Consumption</i>)
TRL	Nivel de Madurez Tecnológica (<i>Technology Readiness Level</i>)
TSA	Adsorción por Cambio de Temperatura (<i>Temperature Swing Adsorption</i>)
TVSA / VTSA	Adsorción por Cambio de Temperatura y Vacío
USD	Dólares Estadounidenses
VSA	Adsorción por Cambio de Vacío (<i>Vacuum Swing Adsorption</i>)

Capítulo 1

Introducción

El cambio climático representa uno de los mayores desafíos ambientales, sociales y económicos del siglo XXI. La emisión de gases de efecto invernadero (GEI) a la atmósfera ha agravado esta situación. Uno de los principales GEI es el CO_2 , cuya emisión deriva principalmente de las actividades antropogénicas como la quema de combustibles fósiles, la deforestación y la industrialización. Desde la era preindustrial, la concentración de CO_2 en la atmósfera ha aumentado desde 280 ppm hasta 420 ppm en la actualidad, lo que implica que se han alcanzado niveles históricos sin precedentes en al menos 800.000 años (IPCC, 2019). En la Figura 1.1 se presenta la curva de Keeling, un gráfico que registra el aumento constante de CO_2 en la atmósfera terrestre. Los datos son obtenidos en el Observatorio de Mauna Loa, Hawái.

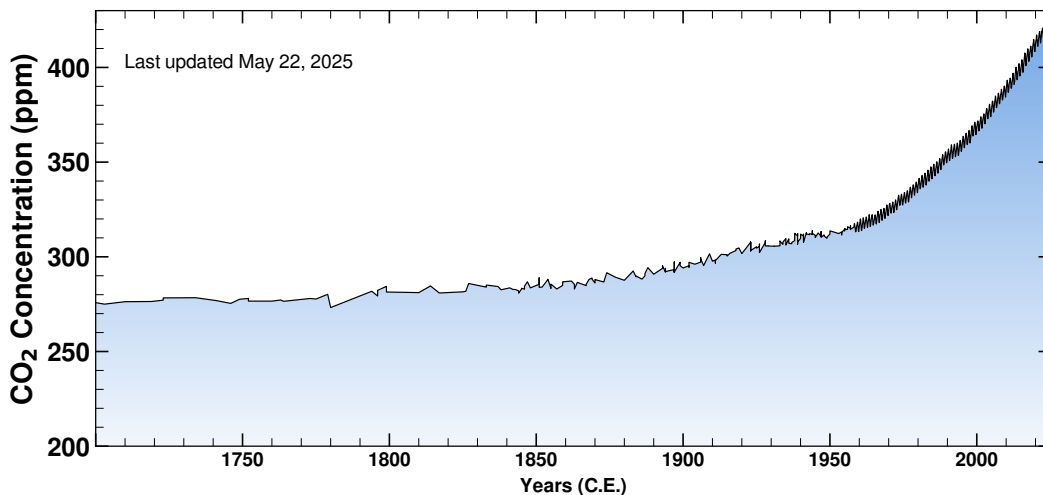


Figura 1.1: Concentración de CO_2 atmosférico en el tiempo (Monroe, 2025).

El aumento de concentración de CO_2 ha intensificado el efecto invernadero, contribuyendo directamente al calentamiento global observado en el último tiempo. Entre 2011 y 2020, la

temperatura media de la superficie terrestre fue 1,1 °C más alta que la temperatura promedio del siglo XIX, siendo la más alta de los últimos 100.000 años. Esto ha generado consecuencias drásticas, como el aumento del nivel del mar, deshielos, olas de calor cada vez más intensas y frecuentes, y eventos climáticos extremos (IPCC, 2019).

En la Figura 1.2 se pueden ver las emisiones de CO₂ anuales históricas. Es posible apreciar que antes de la Revolución Industrial, las emisiones eran bastante bajas. Esta tendencia se mantuvo hasta aproximadamente la primera mitad del siglo XX. A partir de la década de 1950, donde se emitieron sobre 6 mil millones de toneladas de CO₂, la curva comienza a escalar rápidamente. Este comportamiento se ha mantenido hasta hoy, en 2023 se emitió un total de 38 mil millones de toneladas de CO₂ (Ritchie and Roser, 2024).

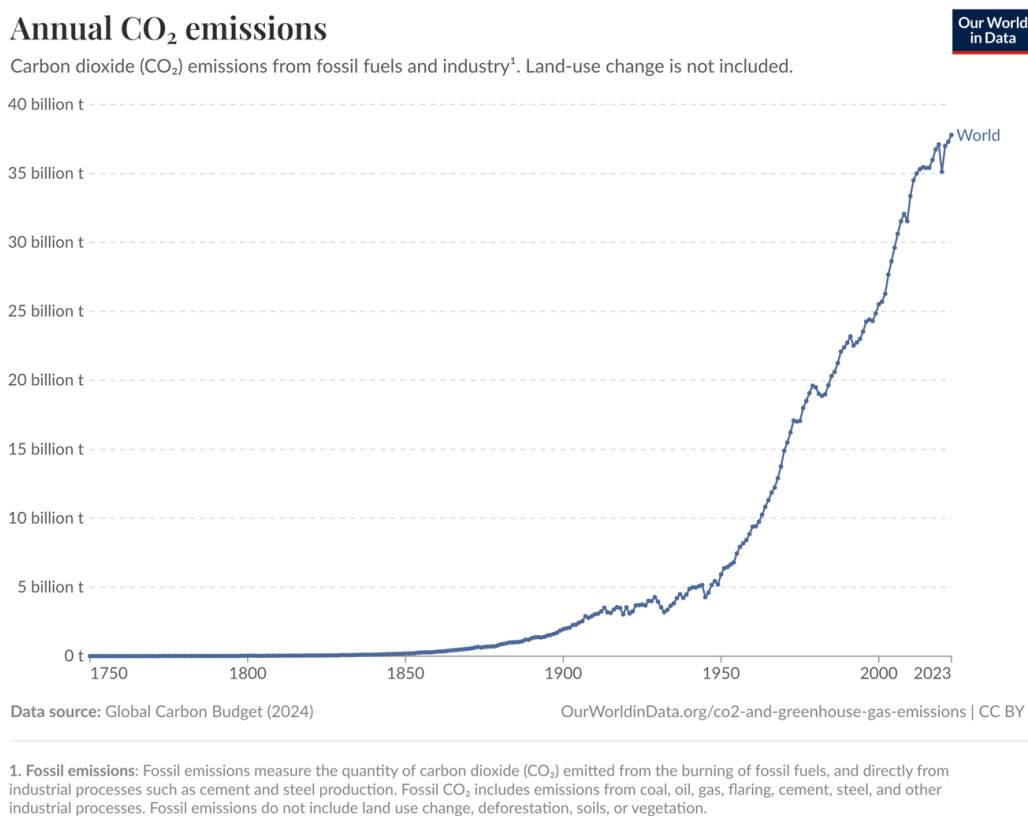


Figura 1.2: Emisiones de CO₂ anuales (Ritchie and Roser, 2024).

A pesar de no ser uno de los principales emisores globales en términos absolutos, Chile presenta emisiones per cápita de CO₂ que son comparables a las de países más desarrollados. En la Figura 1.3 se presentan las emisiones de CO₂ per cápita para distintos países: Reino Unido, Francia, Chile, Suiza y Portugal. Se puede apreciar que las emisiones per cápita chilenas han descendido en los últimos años, pero aún se mantienen cercanas a las de naciones primer mundistas como Francia o Suiza. Este dato evidencia que no se puede ignorar la responsabilidad climática de Chile a nivel

global, simplemente por el tamaño del país o su nivel de desarrollo.

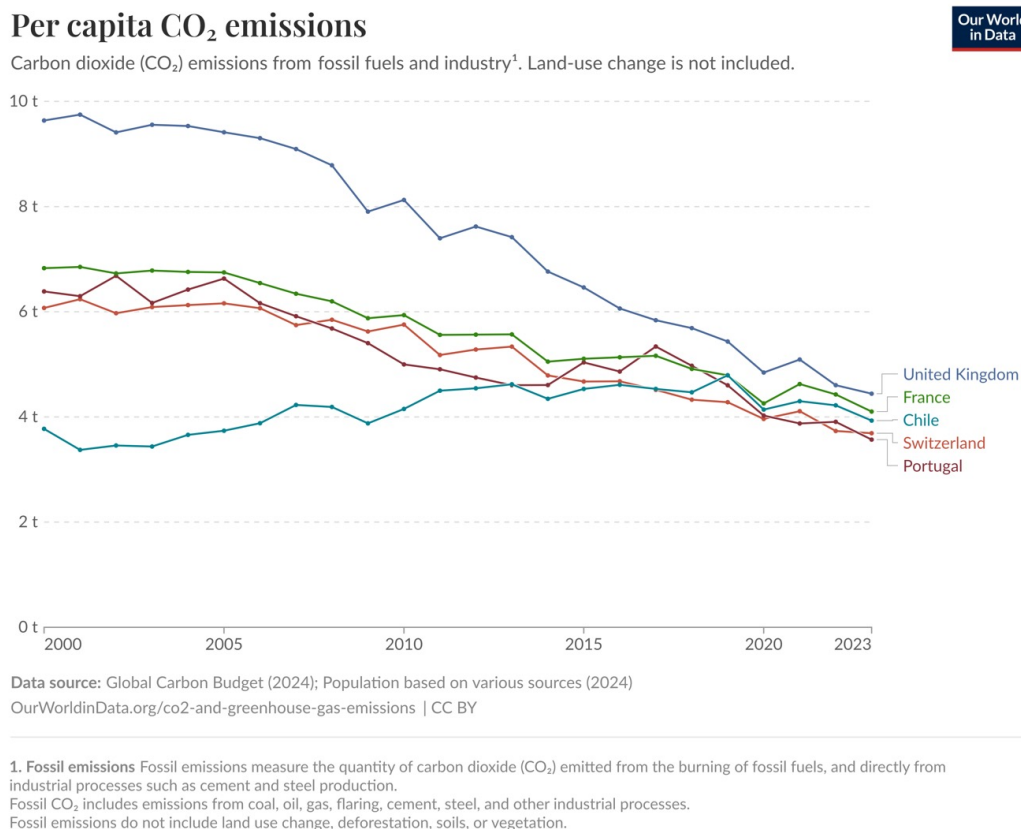


Figura 1.3: Emisiones de CO₂ per cápita para diferentes países (Ritchie and Roser, 2024).

Es por esto que se adoptó el acuerdo de París en 2015, un tratado internacional jurídicamente vinculante que trata sobre el cambio climático. Su objetivo principal es limitar el calentamiento global a muy por debajo de 2 °C, idealmente a 1,5 °C, en comparación con los niveles preindustriales. Para alcanzar esta meta, se deben reducir significativamente las emisiones de GEI y, además, implementar tecnologías capaces de remover CO₂ de la atmósfera (UNFCCC, 2025).

Según IPCC (2019), para limitar el aumento de la temperatura media global a menos de 1,5 °C hacia fines de siglo, no basta solo con reducir drásticamente las emisiones, sino que es indispensable implementar tecnologías de emisiones negativas, que sean capaces de remover el CO₂ ya presente en la atmósfera. Las emisiones antropógenas globales netas de CO₂ deben disminuir en un 45% aproximadamente de aquí a 2030 con respecto a los niveles de 2010 y alcanzar emisiones netas cero en 2050.

Bajo este contexto, surgen las tecnologías de remoción de carbono (CDR), que se definen como aquellas que permiten remover de forma permanente el CO₂ de la atmósfera. Por otro lado, existen las tecnologías de reducción de carbono como la captura y almacenamiento de carbono (CCUS), las

que se centran en capturar el CO_2 en su punto de emisión (usualmente chimeneas de industrias) e impiden su llegada a la atmósfera. Las tecnologías CDR son clave para compensar las emisiones residuales y alcanzar los objetivos de descarbonización establecidos en el Acuerdo de París. Se estima que para mantener el calentamiento por debajo de $1,5^\circ\text{C}$, será necesario capturar entre 450 y 1000 gigatoneladas de CO_2 antes del año 2100 mediante tecnologías CDR (IPCC, 2022).

Dentro de las tecnologías CDR propuestas destaca la captura directa del aire, la cual ha emergido como una de las alternativas más prometedoras, debido a su carácter permanente, la posibilidad de escalamiento y su capacidad de integración con posibles usos industriales del CO_2 . A pesar de su potencial, DAC posee problemas relacionados con su alta demanda energética, dependencia de energías renovables, sensibilidad a humedad ambiental y altos costos actuales de captura (entre 100-300 USD/ton CO_2). Esto motiva a estudiar su aplicabilidad en el contexto chileno.

En la actualidad, las tecnologías de captura directa de CO_2 desde el aire (DAC) se dividen principalmente en dos enfoques: la adsorción sólida (S-DAC) y la absorción líquida (L-DAC). Cada una presenta requerimientos específicos en cuanto a consumo de energía, uso de agua y condiciones climáticas y operacionales, lo que implica que su aplicación no es uniforme, sino que depende fuertemente del entorno donde se desee implementar (Herzog, 2022). Por este motivo, resulta esencial determinar cuál de estas tecnologías se adapta mejor a la realidad chilena, considerando variables como la disponibilidad de energías limpias, las condiciones ambientales propias de cada región y el nivel de desarrollo industrial del país.

Chile se encuentra en un proceso de transformación de su matriz energética y destaca por su alto potencial en fuentes renovables, especialmente la solar en el norte y la eólica en el sur. A esto se suman condiciones climáticas variadas a lo largo del territorio, lo que lo convierte en un entorno ideal para evaluar el desempeño comparativo de diferentes soluciones DAC.

Un ejemplo concreto del potencial de esta tecnología es el proyecto Haru Oni, ubicado en la región de Magallanes, el cual emplea energía eólica para la producción de combustibles sintéticos en base a hidrógeno verde (Power to X). Sin embargo, a pesar de este tipo de iniciativas, existe una brecha significativa en cuanto a estudios comparativos detallados que analicen técnica y económicamente la implementación de tecnologías DAC en el contexto chileno, lo que refuerza la necesidad de esta investigación.

Dado este contexto, el objetivo de esta memoria es evaluar la viabilidad de aplicar tecnologías DAC en Chile, concentrándose en la adsorción sólida. Se propone comparar los distintos enfoques tecnológicos disponibles, analizar sus requerimientos energéticos y ambientales y estimar los costos.

Es importante resaltar que la metodología de este trabajo plantea una evaluación a dos niveles complementarios. En primer lugar, se lleva a cabo un estudio comparativo-selectivo de tipo cualitativo entre las distintas variantes tecnológicas de DAC que existen en la literatura (concretamente sistemas basados en absorción líquida, L-DAC, y adsorción sólida, S-DAC). Esta

sección tiene como fin fijar criterios técnicos de selección, basados en la aplicabilidad geográfica y climática nacional.

A partir de esta sección, y una vez justificada la elección de la tecnología de adsorción sólida (S-DAC) como la alternativa óptima para las condiciones estudiadas, el trabajo concentra su alcance exclusivamente en la modelación matemática detallada y la evaluación técnico-económica de esta configuración.

Con ello, el propósito final es identificar las condiciones más favorables para su implementación y aportar con una base técnica sólida al desarrollo de soluciones de remoción de carbono en el país.

El siguiente capítulo presentará el estado del arte referente a las tecnologías DAC, detallando sus fundamentos, principales enfoques tecnológicos y casos actuales de implementación.

Capítulo 2

Objetivos y Alcances

2.1 Objetivo General

Evaluar técnica y económicamente la tecnología de captura directa del aire (DAC) de CO₂ mediante adsorción sólida, analizando su viabilidad de implementación en Chile.

2.2 Objetivos Específicos

- i. Analizar y comparar las principales tecnologías DAC basadas en adsorción sólida, considerando materiales sorbentes, isothermas de equilibrio y modos de operación.
- ii. Modelar y simular el desempeño de la tecnología más prometedora, utilizando condiciones climáticas y energéticas representativas del norte de Chile.
- iii. Estimar los costos de inversión (CAPEX) y de operación (OPEX) del proceso, y el costo nivelado (LCOD) por tonelada de CO₂ capturado.

2.3 Alcances

El presente trabajo se limita al desarrollo, validación y simulación de un modelo fenomenológico unidimensional implementado en el entorno computacional MATLAB, enfocado exclusivamente en la tecnología de Captura Directa de Aire mediante adsorción sólida (S-DAC) utilizando un sorbente funcionalizado con aminas. Los límites de batería del sistema analizado comprenden desde la admisión de aire atmosférico hasta la obtención de la corriente de salida enriquecida en CO_2 tras la etapa de desorción. Por consiguiente, se excluyen del alcance de esta memoria el diseño y simulación de etapas posteriores de acondicionamiento, tales como la purificación profunda, compresión, licuefacción, transporte, almacenamiento geológico o utilización industrial del CO_2 capturado. Para una mayor comprensión del sistema considerado en este trabajo, se presenta la Figura 2.1, con un diagrama de flujo del proceso.

Asimismo, la evaluación económica se acota a una estimación de clase preliminar para determinar el Costo Nivelado de Captura (LCOD), considerando costos de capital (CAPEX) y operativos (OPEX) asociados únicamente a la planta de captura y su consumo energético. El análisis de aplicabilidad en Chile está acotado geográficamente a las condiciones climáticas de la zona norte (Región de Antofagasta), integrando el proceso con energía eléctrica, pero sin profundizar en la ingeniería de detalle de la planta de generación eléctrica ni en la infraestructura civil requerida.

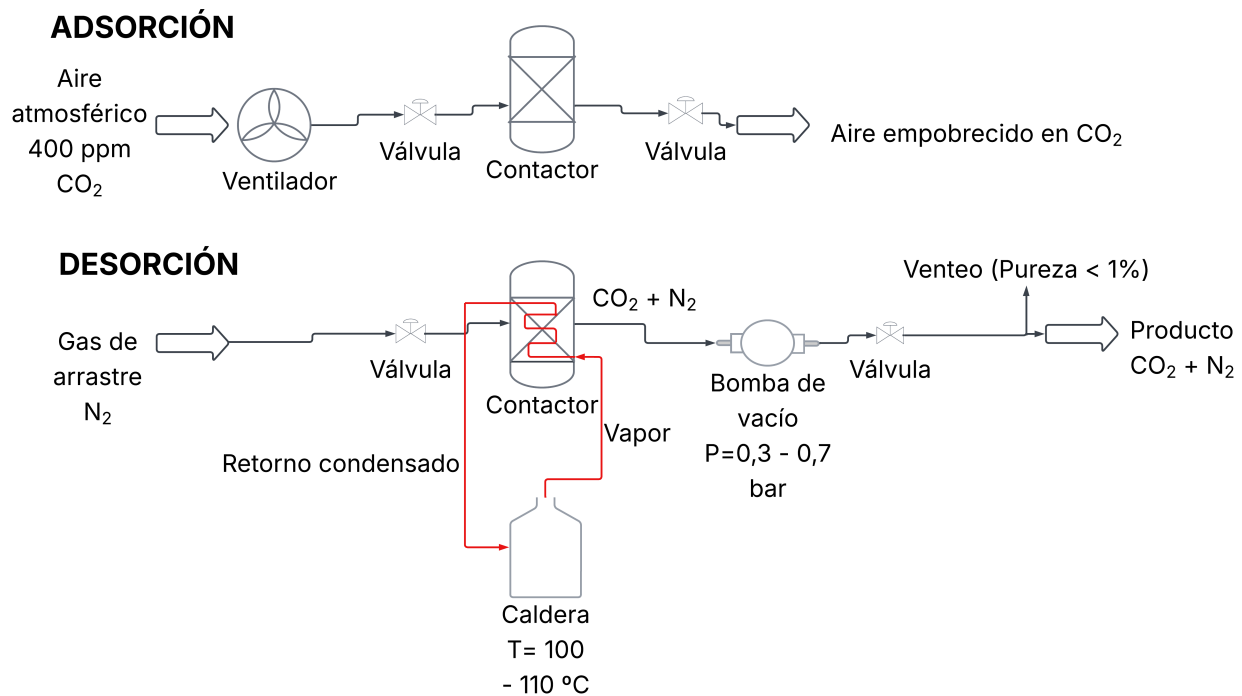


Figura 2.1: Esquema del proceso considerado.

Capítulo 3

Estado del Arte

3.1 Aspectos generales de DAC

Es importante diferenciar la DAC de los métodos convencionales de captura de carbono y almacenamiento/utilización (CCS/CCU). Las tecnologías CCS están diseñadas para capturar CO_2 en el lugar de emisión, es decir, corrientes concentradas provenientes de industrias como plantas de energía (carbón, gas), fábricas de cemento o refinerías. La concentración de CO_2 en el aire atmosférico es aproximadamente 410 ppm o 0,041%, mientras que la concentración de CO_2 en las fuentes industriales es entre 100 y 300 veces mayor, alcanzando valores de entre 10 y 15% en los gases de combustión de calderas a carbón y entre el 15 y 30% en los gases de escape de las plantas de cemento (Bui et al., 2018). Esta diferencia en la concentración conlleva a que DAC sea un proceso de captura más costoso y con mayor dificultad en comparación con CCS. Para suplir la diferencia de concentración, DAC debe tratar volúmenes mucho mayores que los que trata CCS, requiriendo mayor energía por tonelada de CO_2 capturada. Por lo mismo, DAC no pretende apuntar a remover nuevas emisiones de CO_2 de origen antropogénico, sino que disminuir la concentración de CO_2 que ya está presente en la atmósfera, independiente de su origen o de cuando fue emitido. No son competencia, sino más bien complementarias (Herzog, 2022). En la Figura 3.1 se puede ver una imagen que representa las diferencias entre CCS y DAC.

COMPARACIÓN ENTRE MÉTODOS DE CAPTURA DE CARBONO: CCS VS DAC



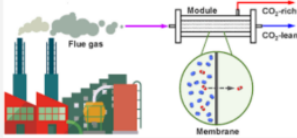
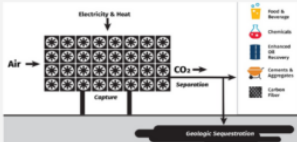
	Imagen	Objetivo	Aplicaciones
Captura y almacenamiento de carbono en fuentes fijas (CCS)		Capturar el CO2 generado como consecuencia de procesos industriales antes que sea liberado a la atmósfera.	A la salida de procesos industriales: producción de gas natural, hidrógeno, etanol, fertilizantes, entre otros.
Captura directa de carbono (DAC)		Capturar CO2 una vez que este ya fue liberado a la atmósfera.	En espacios abiertos donde capturan grandes cantidades de aire atmosférico.

Figura 3.1: Comparación entre CCS y DAC (Carbon Neutral+, 2025).

Dentro del amplio espectro de tecnologías de CDR, la DAC se clasifica junto a otras opciones principalmente biológicas, geoquímicas y químicas, según el proceso utilizado para remover el CO₂. También es posible categorizarlas por la escala temporal de almacenamiento del carbono, que varía desde décadas a milenios (IPCC, 2022). En las tablas 3.1 y 3.2 se presenta un resumen de los métodos terrestres CDR y un resumen de los métodos oceánicos CDR, respectivamente.

Las alternativas biológicas incluyen la reforestación, la restauración de suelos y la conservación de ecosistemas capaces de capturar carbono de forma biológica, en general. Por otro lado, las opciones geoquímicas y químicas se basan en procesos físico-químicos y, como ejemplo, existen la BECCS, la mineralización acelerada, el aumento de la alcalinidad oceánica y la DAC. Esta última destaca por su posibilidad de implementación modular y la independencia espacial que tiene respecto a las fuentes puntuales de emisión (IPCC, 2022).

Tabla 3.1: Resumen de métodos terrestres de remoción de CO₂ (IPCC, 2022)

Método CDR	Escala temporal	Costo (\$/tCO ₂)	Riesgos y trade-offs
Forestación, Reforestación	Décadas a siglos	0–240	Competencia por la tierra
Gestión forestal	Décadas a siglos	No hay datos	Reducción de biodiversidad
Secuestro en suelos	Décadas a siglos	45–100	Limita la producción agrícola
Biochar	Siglos a milenios	10–345	Competencia por biomasa
BECCS	>10.000 años	50–200	Competencia por la tierra
DACCS	>10.000 años	100–300	Alta demanda energética, uso de agua
Meteorización de rocas	>10.000 años	50–200	Polvo, posible emisión de GEI por uso energético
Manejo de humedales	Décadas a siglos	No hay datos	Competencia por la tierra

Tabla 3.2: Resumen de métodos oceánicos de remoción de CO₂ (IPCC, 2022)

Método CDR	Escala temporal	Costo (\$/tCO ₂)	Riesgos y trade-offs
Manejo de carbono azul	Décadas a siglos	No hay datos	Pérdida de carbono si se degrada el ecosistema
Alcalinidad oceánica	>10.000 años	40–260	Posible emisión de GEI en el transporte
Fertilización oceánica	Siglos a milenios	50–500	Impacto en redes tróficas, biodiversidad, acidificación

Realizando una comparativa entre las tecnologías CDR centrada en el territorio chileno, se puede mencionar que, por ejemplo, la forestación (plantación de árboles en zonas donde antes no había bosques) y la reforestación (recuperación de áreas que han perdido su cobertura forestal) son estrategias ampliamente conocidas y relativamente económicas para remover CO₂, con costos estimados entre 0 y 240 dólares por tonelada. Sin embargo, su implementación a gran escala requiere enormes superficies de tierra fértil, lo que puede generar competencia con la agricultura, afectar la biodiversidad y, en el caso de Chile, volverse inviable en regiones áridas como el norte.

Otras soluciones como el secuestro de carbono en suelos o el uso de biochar (carbón vegetal aplicado al suelo para mejorar su capacidad de retener carbono) también destacan por su bajo costo y su potencial de almacenamiento a largo plazo. Aun así, están condicionadas por la disponibilidad de biomasa y pueden interferir con la producción de alimentos si no se gestionan adecuadamente (IPCC, 2022).

Por su parte, tecnologías más avanzadas como BECCS (bioenergía con captura y almacenamiento de carbono) y DAC (captura directa del aire) ofrecen la ventaja de almacenar CO₂ durante miles de años y pueden integrarse en procesos industriales. No obstante, estos métodos implican inversiones elevadas, un alto consumo energético y la necesidad de infraestructura compleja. En particular, DAC se diferencia por su flexibilidad geográfica: puede instalarse en distintos lugares sin depender

de fuentes puntuales de emisión ni condiciones de suelo específicas. Además, produce CO_2 de alta pureza que puede ser aprovechado por diversas industrias. A pesar de estas ventajas, sigue enfrentando barreras importantes, como su costo elevado (entre 100 y 300 dólares por tonelada) y su demanda de recursos como agua y energía (IPCC, 2022).

Finalmente, existen alternativas marinas como la alcalinización de los océanos o la fertilización con hierro. Estas estrategias apuntan a almacenar carbono durante milenios, pero conllevan riesgos ambientales significativos. Por ejemplo, pueden alterar el equilibrio químico del océano o afectar las redes alimentarias marinas, y además están lejos de contar con una regulación clara o tecnologías suficientemente maduras para su aplicación segura a gran escala (IPCC, 2022).

La ventaja que presenta DAC frente a otras tecnologías CDR es que es el método más completo. A diferencia de otras tecnologías como BECCS y Manejo de carbono azul, no requiere de grandes hectáreas de tierra ni debe estar ubicada en zonas costeras. Sumado a ello, DAC puede ayudar a disminuir las emisiones difíciles de evitar y las emisiones de fuentes distribuidas. Estas incluyen las emisiones anuales de la industria del hormigón ($\sim 8\%$), el transporte ($\sim 24\%$), la industria siderúrgica ($\sim 11\%$) y los incendios forestales ($\sim 0,8\%$) (Ozkan et al., 2022). DAC, al ser flexible con su localización, puede optimizar temas logísticos, reducir costos de transporte de CO_2 y aprovechar energías renovables, como la solar o la eólica.

Sin embargo, DAC no se libra de algunas críticas. Estudios sugieren que su costo actual y la alta demanda energética lo hacen inviable a gran escala sin un marco político robusto y subsidios adecuados (Ozkan, 2021). Además, se requiere infraestructura de transporte y almacenamiento que en muchos países, incluyendo Chile, aún está en fase de evaluación.

En la Figura 3.2 se presenta un mapa con la ubicación de las plantas actuales de DAC (círculos) y CCS (triángulos) en el mundo. Se destaca el crecimiento de instalaciones en Europa y Norteamérica, principalmente. Sin embargo, en el caso de DAC, aún no hay proyectos operativos en Latinoamérica, lo que refuerza la relevancia de evaluar su aplicabilidad en Chile. La planta DAC que se encuentra en Chile es la referente a Haru Oni. Esta planta aún no se encuentra operativa, y se prevé que pueda comenzar a funcionar en el primer trimestre de 2025 (HIF Global, 2024).

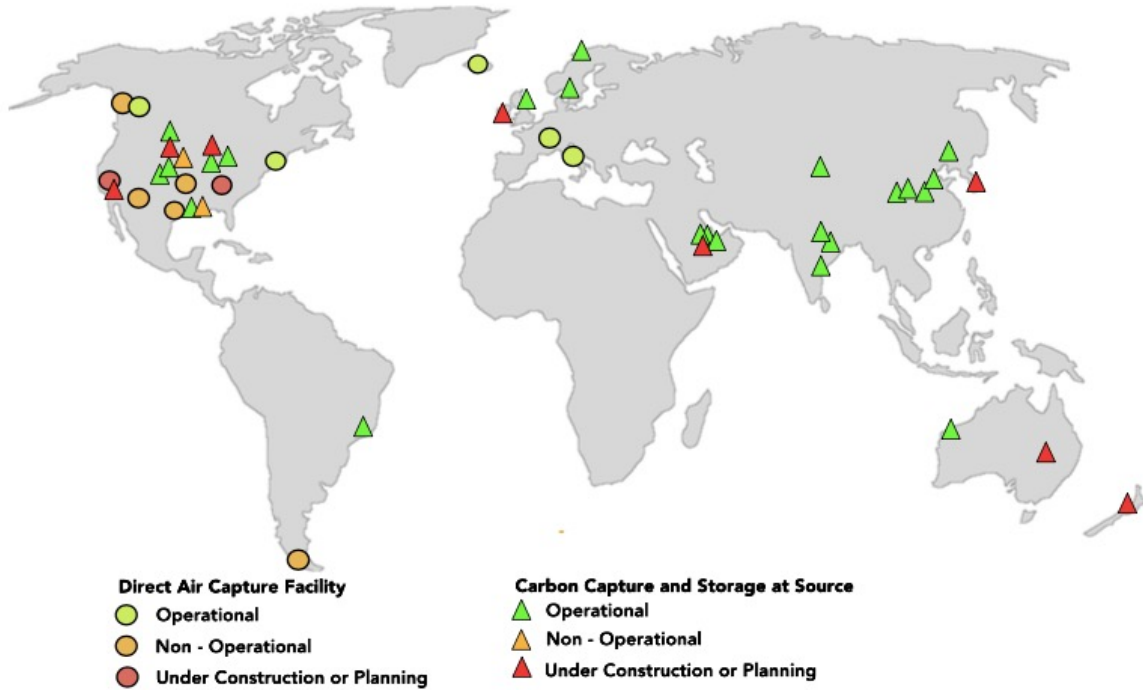


Figura 3.2: Plantas DAC y CCS alrededor del mundo (Ozkan et al., 2022).

3.2 Clasificación de tecnologías DAC

A la fecha, existen dos tecnologías principales relacionadas con la captura directa de aire. Estas se clasifican según el medio utilizado para retener el CO_2 desde el aire. Las tecnologías en cuestión son la absorción líquida (L-DAC) y la adsorción sólida (S-DAC). Ambas funcionan con el mismo principio de contacto entre el aire y un sorbente con afinidad física o química con el CO_2 , pero difieren de manera significativa en temas de diseño, requerimiento energético y condiciones de operación (Herzog, 2022).

En general, ambos procesos tienen los siguientes pasos en común (Herzog, 2022):

- i. El aire entra en contacto con el sorbente y el CO_2 es eliminado de la corriente de aire al unirse químicamente con el sorbente.
- ii. El CO_2 es retirado del sorbente y el sorbente se reutiliza para capturar más CO_2 desde el aire. Para separar el CO_2 del sorbente, se debe aumentar la temperatura (agregando energía en forma de calor), disminuir la presión (mediante vacío) y/o incluir un procesamiento químico.
- iii. El CO_2 retirado se debe presurizar para su posterior transporte y almacenamiento.

En la Figura 3.3 se presenta un diagrama de un proceso genérico de sorción y desorción DAC.

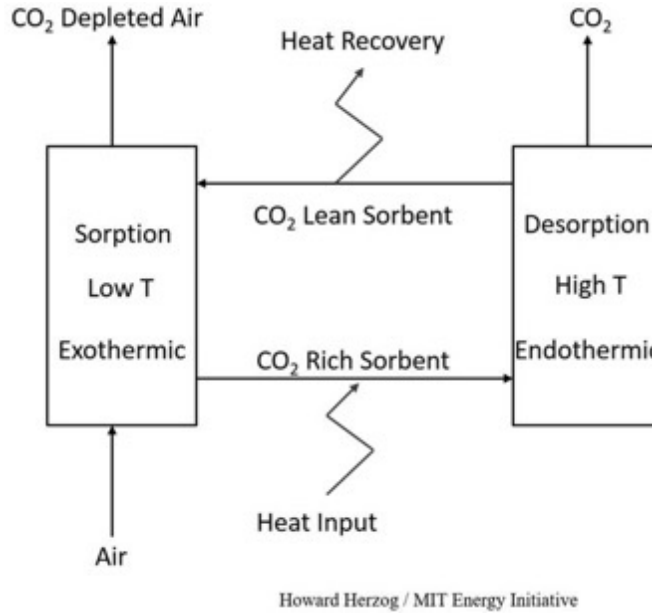


Figura 3.3: Esquema de procesos genéricos de sorción y desorción DAC (Herzog, 2022).

Existe una diferencia fenomenológica entre ambas tecnologías. La absorción (utilizada en L-DAC) es un fenómeno en donde el CO_2 se disuelve y difunde en el seno de un líquido (solvente), reaccionando químicamente en toda la masa del fluido. Por el contrario, la adsorción (utilizada en S-DAC) es un fenómeno superficial, donde las moléculas de CO_2 se adhieren únicamente a la superficie interna de los poros de un material sólido, formando una capa molecular sin penetrar la estructura interna del material (Ben-Mansour et al., 2016). Para ilustrar esta diferencia conceptual entre ambas tecnologías, se presenta la Figura 3.4:

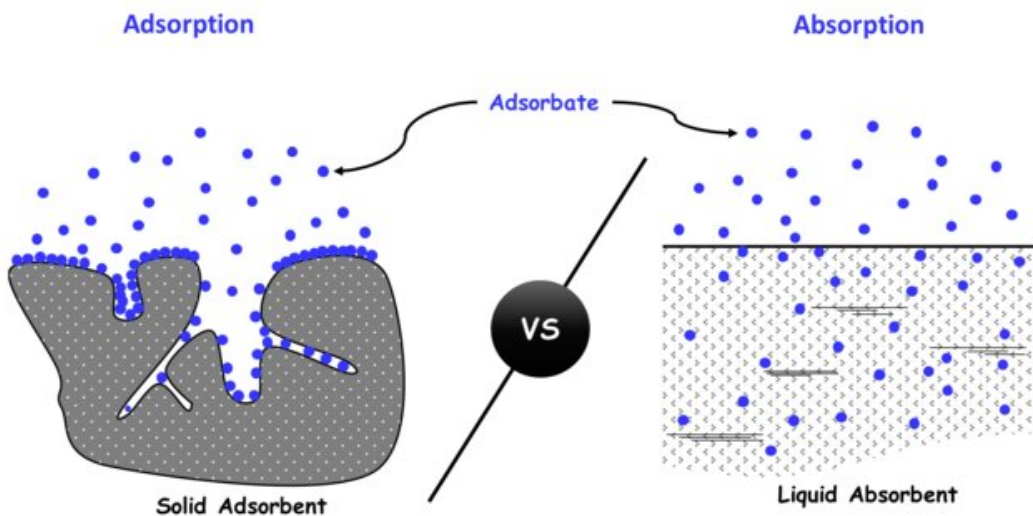
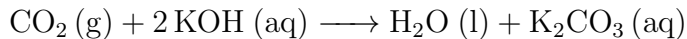


Figura 3.4: Adsorción versus absorción (Zbair and Bennici, 2021).

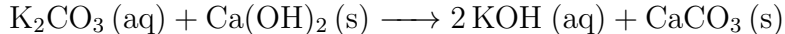
3.2.1 Captura con solventes líquidos (L-DAC)

En el caso de absorción líquida, el aire es forzado a través de una solución alcalina, típicamente hidróxido de sodio (NaOH) o hidróxido de potasio (KOH), reaccionando y generando carbonatos (CaCO_3). Luego, tras una serie de reacciones químicas y procesos térmicos, el carbonato es transformado nuevamente en el sorbente original y el CO_2 concentrado es liberado para su posterior almacenamiento. Este sistema se caracteriza por requerir temperaturas elevadas en la etapa de regeneración, del orden de 900°C , y por consumir grandes volúmenes de agua (Li and Yao, 2024).

En concreto, el proceso de L-DAC empleado por la empresa Carbon Engineering funciona con una solución de hidróxido de potasio, la cual remueve el CO_2 del aire mediante la siguiente reacción (Herzog, 2022):



El proceso de regeneración es bastante complejo, debido a la fuerte unión que se genera entre el CO_2 y el sorbente. El sorbente rico en CO_2 (K_2CO_3) es enviado a un precipitador, denominado por la empresa como “Pelletizer” o “Pellet Reactor”, que es un reactor de lecho fluidizado con pellets. El K_2CO_3 se mezcla con $\text{Ca}(\text{OH})_2$, produciendo la siguiente reacción (Herzog, 2022):



Esto genera que el K_2CO_3 precipite en forma de pellets de CaCO_3 y el KOH es regenerado, por lo que vuelve a ser introducido al contactor DAC para iniciar otro ciclo de absorción. El CO_2 , ahora presente en el CaCO_3 , abandona el reactor y es enviado a un calcinador, donde antes debe ser secado y pre-calentado (Herzog, 2022).

El calcinador es un reactor de lecho fluidizado circulante con combustión de oxígeno que opera a 900°C . A esta condición, el CaCO_3 se descompone en CaO y CO_2 . El primero es enviado a la unidad de apagado “Slaker”, mientras que el CO_2 es liberado para su posterior almacenamiento. Esta reacción requiere de una cantidad significativa de calor, que por lo general es aplicada mediante la combustión de gas natural. Esta combustión se lleva a cabo con una corriente de oxígeno puro proveniente de una planta de separación de aire criogénico, con el fin de evitar una posible contaminación, ya que si se hiciera la combustión con aire, el CO_2 producido podría contaminarse con nitrógeno. La mayoría del CO_2 producido por la combustión de gas natural es capturado y sumado al CO_2 capturado desde el aire (Herzog, 2022).

La unidad de apagado se encarga de hacer reaccionar el CaO con vapor de agua para formar $\text{Ca}(\text{OH})_2$, el cual es enviado de regreso al precipitador. Esta reacción es altamente exotérmica (libera energía), por lo que esta energía es usada para secar y precalentar la corriente de CaCO_3 previo al calcinador. El vapor residual es enviado a una turbina aledaña para la generación de

electricidad requerida por el proceso (Herzog, 2022).

En la Figura 3.5 se presenta un resumen de las reacciones y del proceso anteriormente descrito. Por otro lado, en la Figura 3.6 se presenta un diagrama esquemático del funcionamiento de un contactor L-DAC. Esto representa únicamente la absorción, no la regeneración.

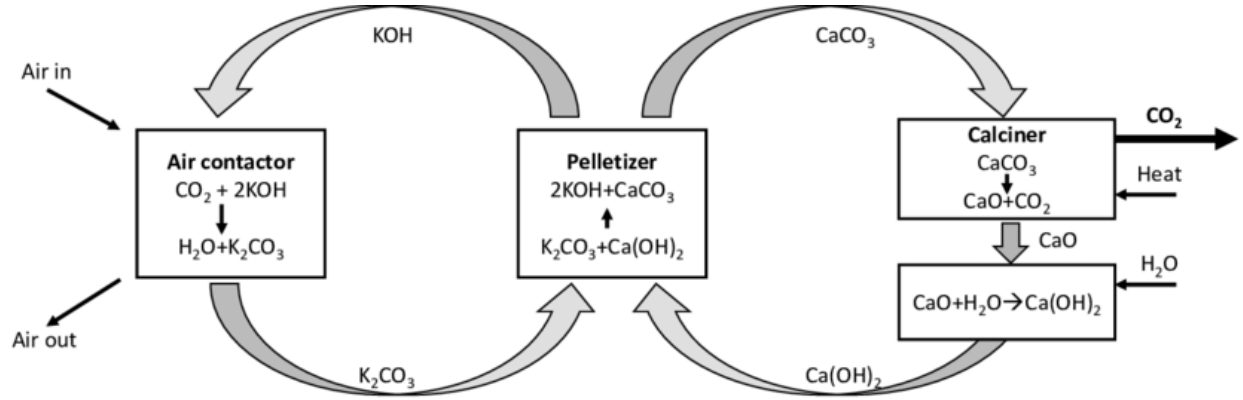


Figura 3.5: Principales procesos y reacciones presentes en el proceso L-DAC utilizado por Carbon Engineering (Burhenne et al., 2017).

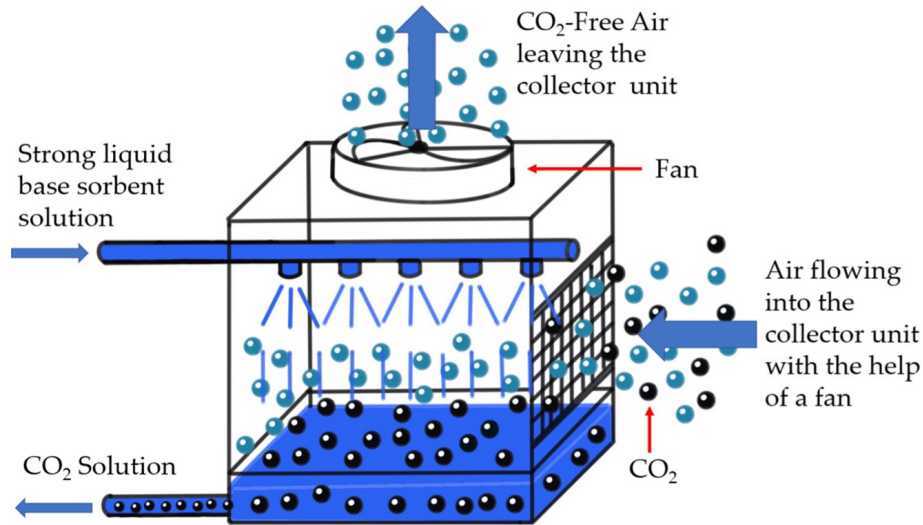


Figura 3.6: Diagrama de contactor L-DAC (Garza et al., 2023).

3.2.2 Captura con sorbentes sólidos (S-DAC)

La adsorción sólida utiliza materiales sólidos que capturan CO_2 en su superficie mediante procesos físicos (fisisorción) o químicos (quimisorción). El contacto se produce entre el aire y el lecho poroso de los sólidos o resinas, usualmente funcionalizadas con grupos amina. El proceso inicia con ventiladores, que ingresan el aire atmosférico hacia el contactor. Allí, el CO_2 reacciona químicamente

con el material adsorbente sólido y se adhiere a él. Una vez se satura el medio, se cierra el módulo y se da paso a la regeneración. Para regenerar el sorbente se debe aplicar calor en bajas temperaturas (80°C - 100°C) y generar presión de vacío, liberando el CO_2 sin comprometer el material sólido. A pesar de requerir menos energía y poder operar en ciclos más cortos, tiene sensibilidad a la humedad y requiere de materiales con una alta estabilidad (Li and Yao, 2024). En la Figura 3.7 se presenta un diagrama esquemático del funcionamiento del sistema S-DAC.

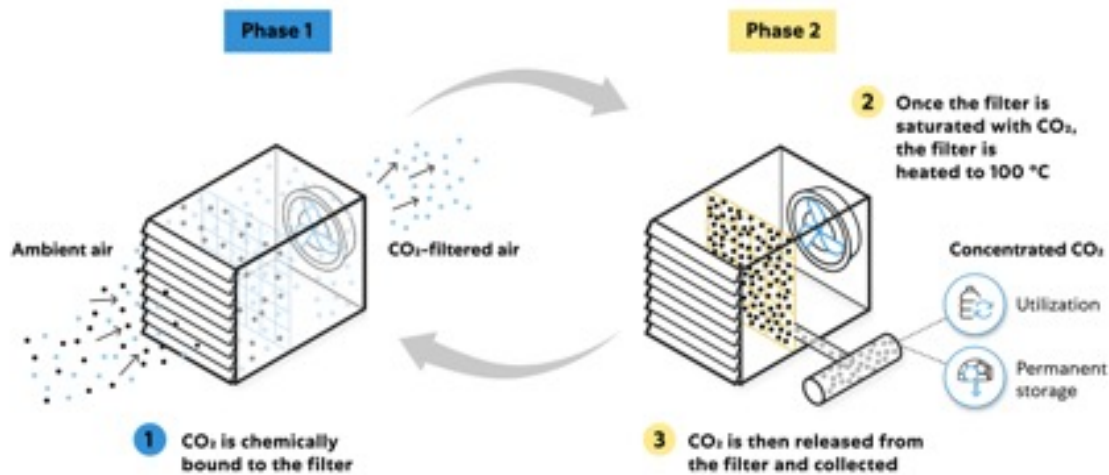


Figura 3.7: Funcionamiento de S-DAC (Climeworks, 2023).

3.2.3 Tecnologías emergentes

Existen algunas tecnologías que han emergido en el último tiempo dada la necesidad de encontrar soluciones más eficientes y escalables para DAC. Algunas de ellas son (Li and Yao, 2024):

- **Electro-swing Adsorption (ESA):** Es un método que utiliza campo eléctrico para alternar la afinidad del sorbente con el CO_2 , permitiendo su captura y liberación con menor necesidad de calor.
- **Moisture-swing Adsorption (MSA):** Utiliza sorbentes que capturan CO_2 en condiciones secas y lo liberan en presencia de humedad, sin requerir calor.
- **DAC con membranas (m-DAC):** Emplea membranas selectivas para separar el CO_2 del aire.

Estas tecnologías, si bien tienen un gran potencial, aún presentan TRLs menores a 6 y algunos desafíos que se deben seguir investigando para que puedan ser escaladas a nivel industrial (IEA, 2022). Es por ello que no serán considerados para el análisis de este trabajo.

3.3 Comparativa tecno-económica

Un análisis comparativo de las tecnologías de captura directa del aire permite diferenciar las características como el desempeño energético, costos asociados, consumo de agua, requerimientos materiales y nivel de madurez tecnológica. Esta sección presenta una revisión de la literatura técnica reciente, para evaluar estos aspectos en las dos principales tecnologías DAC: captura con solventes líquidos (L-DAC) y captura con sorbentes sólidos (S-DAC).

3.3.1 Consumo energético y eficiencia

Este es uno de los factores más relevantes en la viabilidad técnica y económica de las tecnologías DAC. Los sistemas L-DAC presentan una demanda energética considerable, entre 6,57 y 9,9 GJ/ton CO₂ capturado, debido a los requerimientos en el calcinador para la regeneración del sorbente (Ozkan et al., 2022). Por otro lado, S-DAC utiliza energía de baja o media temperatura, con consumos típicos que van desde 5 a 8,3 GJ/ton CO₂ capturado, pudiendo aprovechar calor residual o energía solar térmica (Garza et al., 2023). Ambos sistemas requieren energía eléctrica para el uso de bombas y ventiladores, aunque la proporción es menor frente a la energía térmica.

En la literatura se destaca la posibilidad de integrar S-DAC con fuentes de energía renovable, favoreciendo su uso en regiones con alta radiación solar. Al tener una menor temperatura de operación, S-DAC permite una mayor flexibilidad al momento de integrarse a procesos industriales ya existentes.

3.3.2 Requerimientos de agua, terreno y materiales

Los procesos L-DAC, considerando que usan soluciones alcalinas, implican un consumo intensivo de agua tanto por evaporación como por reposición del solvente. Algunos estudios reportan consumos de hasta 7 tonH₂O/tonCO₂ capturado (Ozkan et al., 2022), esto representa una limitación si se desea implementar esta tecnología en regiones áridas. En contraste, S-DAC requiere cantidades mínimas de agua (e incluso es capaz de captar agua).

En cuanto al uso de terreno, L-DAC requiere más espacio por el uso de calderas, reactores y el proceso de regeneración en general, mientras que S-DAC es una tecnología modular, por lo que depende de la escala de la planta. Para establecer una comparativa, en una planta L-DAC con una producción de 1 MtonCO₂/año el espacio requerido para los contactores y el proceso de regeneración es de aproximadamente 2,5 hectáreas. En el caso de S-DAC, el espacio requerido para una planta con la misma capacidad de producción oscila entre 1,2 y 1,7 hectáreas. Cabe destacar que no se incluye el espacio requerido para la generación de energía (Garza et al., 2023).

3.3.3 Costos estimados (CAPEX y OPEX)

Los costos asociados a DAC dependen del tipo de tecnología, la escala del proyecto, los precios de energía y el entorno geográfico. Los costos informados en la literatura son de un rango bastante amplio y dependen del caso específico que se analice. Climeworks (S-DAC) reporta un costo de 600 USD/ton CO₂ y Carbon Engineering (L-DAC) informa un rango entre 94 y 232 USD/ton CO₂. Si bien estos valores pueden parecer altos, hay análisis que proyectan una disminución a un costo de captura de entre 100 y 200 USD/ton CO₂ e incluso 60 USD/ton CO₂ para el año 2040 o 2050 (Ozkan et al., 2022).

IEA (2022) reporta que los costos de captura de DAC varían entre 100 y 1000 USD/ton CO₂: para L-DAC entre 95 y 230 USD/ton CO₂ y para S-DAC entre 100 y 600 USD/ton CO₂.

En cuanto al CAPEX, el costo para S-DAC se informa en 1000 USD/ton CO₂ y para L-DAC es de 150 USD/ton CO₂. Sin embargo, en rangos bajos se estiman CAPEX de 80 USD/ton CO₂ y 200 USD/ton CO₂, respectivamente (Ozkan et al., 2022).

Con lo que respecta al OPEX, para S-DAC van en un rango de 5 a 50 USD/ton CO₂ y para L-DAC oscila entre 40 y 80 USD/ton CO₂ (Ozkan et al., 2022).

En la Figura 3.8 se presenta una comparativa de rangos de CAPEX y OPEX entre S-DAC y L-DAC.

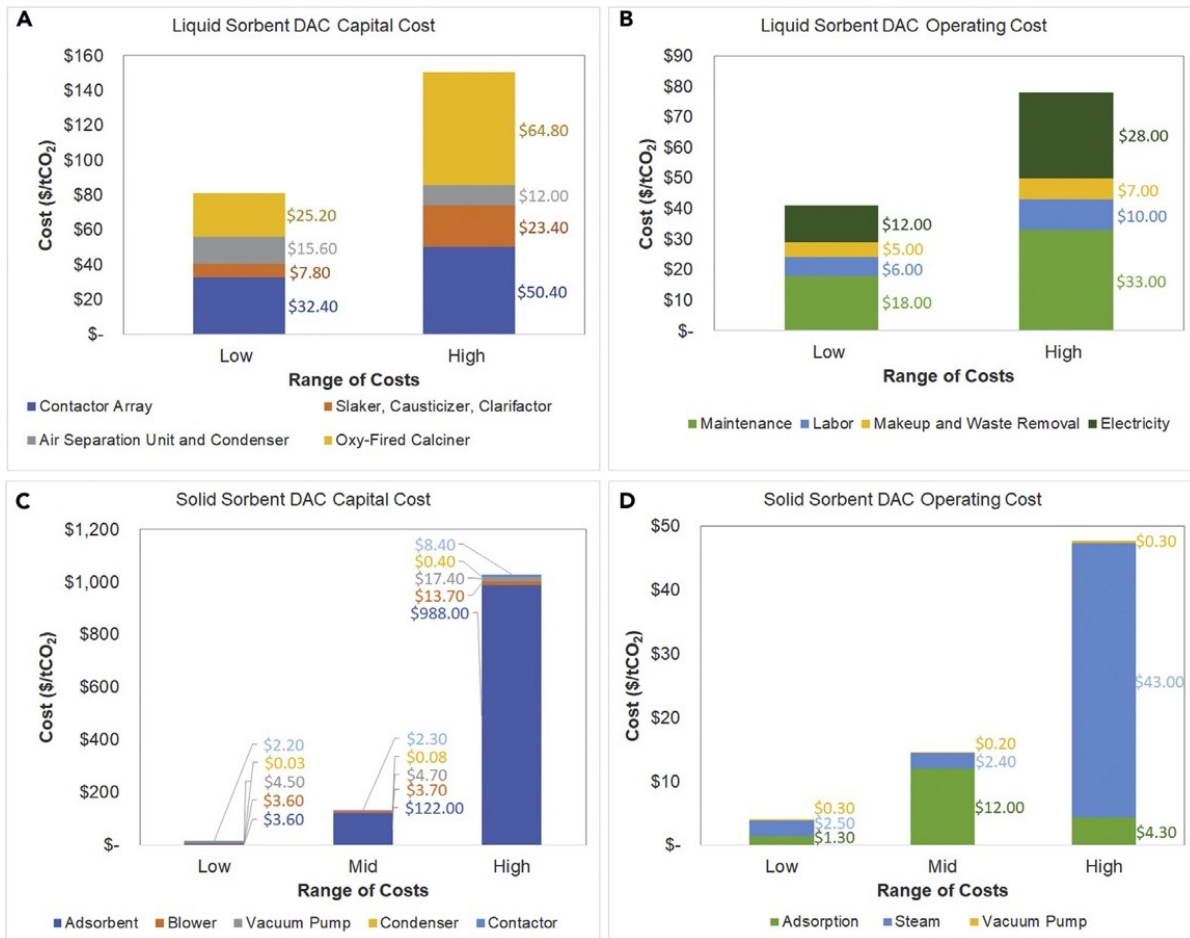


Figura 3.8: Desglose de costos y comparativa entre S-DAC y L-DAC (Ozkan et al., 2022).

3.3.4 Nivel de madurez tecnológica y escalabilidad

Ambas tecnologías han presentado avances en la última década, pero tienen diferencias en su nivel de madurez. S-DAC cuenta con plantas comerciales en operación, como las plantas de Climeworks en Suiza e Islandia. En el caso de L-DAC, Carbon Engineering cuenta con plantas piloto en Canadá y proyectos a gran escala en Estados Unidos y Reino Unido (Bui et al., 2018). En la Figura 3.9 se presentan las plantas DAC a nivel mundial.

Un simple módulo de S-DAC tiene la capacidad de remover aproximadamente 50 ton CO₂/año. Una planta S-DAC puede incluir múltiples módulos, donde la mayor planta instalada y operativa al día de hoy captura 4000 ton CO₂/año. Si las condiciones ambientales lo permiten, S-DAC puede capturar la humedad ambiental y recuperar el agua, donde los primeros prototipos eran capaces de remover aproximadamente 1 tonelada de agua por tonelada de CO₂ capturado (IEA, 2022).

Una planta comercial de L-DAC que opera de manera continua puede capturar alrededor de 1.000.000 ton CO₂/año. Se estima que se utilizan 4,7 toneladas de agua por tonelada de CO₂

capturado a condiciones de 20 °C y humedad relativa de 64% (IEA, 2022).

Otro factor importante es la escalabilidad. S-DAC se adapta mejor a diseños modulares, lo que permite un escalamiento progresivo al ir agregando más unidades. L-DAC, en cambio, requiere de instalaciones con una infraestructura más compleja (Herzog, 2022).

Tech provider	Plant type	DAC type		Location	Approx capture capacity (tCO ₂ per year)	Market application
		 S-DAC	 L-DAC			
Climeworks	16 pilots	✓		Across Europe	2,000	Utilisation
	Commercial (Orca)	✓		Iceland	4,000	Utilisation & Storage
	Under construction (Mammoth)	✓		Iceland	36,000	TBD
Carbon Engineering	Pilot		✓	Canada	350	Utilisation
	Under construction		✓	United States	500,000 - 1,000,000	EOR & Storage
Global Thermostat	2 pilots - not operating	✓		United States	14,000	N/a
	Under construction	✓		United States	4,000	Utilisation

Figura 3.9: Tabla de las 3 principales compañías DAC y sus proyectos (Hunt, 2024).

3.3.5 Conclusión de la comparación

Ambas tecnologías presentan ventajas y desventajas. L-DAC se caracteriza por su alta capacidad de captura y pureza del CO₂, pero se ve limitado por su alto consumo energético, uso de agua y complejidad operativa. Por otro lado, S-DAC posee ventajas en su eficiencia energética, flexibilidad de integración con energías renovables y menor requerimiento hídrico (Li and Yao, 2024). En la Tabla 3.3 se presenta una comparativa entre ambas tecnologías.

Tabla 3.3: Comparación entre L-DAC y S-DAC (IEA, 2022).

Característica	Absorción líquida	Adsorción sólida
Uso energético	Calor alto (300–900 °C) y uso de electricidad (bombas y ventiladores)	Calor bajo-medio (80–120 °C) y uso de electricidad (ventiladores y vacío)
Rango energético	~6–10 GJ/tCO ₂	~5–8 GJ/tCO ₂
Capacidad de captura	Gran escala (0,5–1 MtonCO ₂ /año)	Modular (50 tonCO ₂ /módulo/año)
Consumo de agua	0–50 tH ₂ O/tCO ₂	0,8–2 tH ₂ O/tCO ₂
Uso de tierra	0,4 km ² /Mton CO ₂	1,2–1,7 km ² /Mton CO ₂
Costo nivelado de captura	Hasta 340 USD/ton CO ₂	Hasta 540 USD/ton CO ₂
Ventajas	Proceso químico más establecido. Alta capacidad de captura	Más flexible energéticamente. Menor consumo de agua.
Desventajas o desafíos	Alta demanda energética. Degradación de solvente y corrosión	Degradación de sorbente. Sensibilidad a humedad. Requiere escalamiento modular.
Madurez tecnológica o TRL (Bui et al., 2018)	6–8 (Comercial–Demostrativo)	6–9 (Comercial–Demostrativo)
Ejemplos	<i>Carbon Engineering</i>	<i>Climeworks</i> , <i>Global Thermostat</i> , <i>CarbonCapture Inc.</i>

3.4 Aspectos técnicos de la captura por adsorción (S-DAC)

En esta sección se detallarán los principales enfoques operacionales que han sido aplicados en tecnologías S-DAC, así como los materiales más comunes reportados en la literatura para la remoción eficiente de CO₂ desde el aire.

3.4.1 Modos de operación

Los procesos de adsorción se pueden clasificar según el modo de operación. Estos incluyen TSA, PSA, VSA, ESA y procesos híbridos como TVSA o TPSA (Wu et al., 2022).

- Pressure swing adsorption (PSA): son aplicados para remover una impureza que esté fuertemente adsorbida en una mezcla de gases. El CO₂ es adsorbido a alta presión y desorbido del adsorbente a presión atmosférica. Esto se realiza en cuatro pasos: presurización, adsorción, despresurización y purga (Siqueira et al., 2017). En la Figura 3.10 se presenta un

esquema del proceso de adsorción PSA. El ciclo funciona de la siguiente manera:

Presurización: El aire pasa por un compresor que aumenta la presión parcial de CO_2 . Luego, el aire comprimido ambienta la columna para generar un entorno de alta presión para la posterior adsorción. **Adsorción:** el aire a alta presión entra a la columna. El CO_2 es adsorbido selectivamente por el adsorbente, mientras que otros gases como N_2 salen. **Despresurización:** Se abre una válvula de venteo que permite que el aire se expanda hasta la presión atmosférica. El CO_2 sale de la columna. **Purga:** El CO_2 es desorbido y descargado completamente de la columna con un gas de purga a presión atmosférica que opera a contracorriente (Zhao et al., 2017b).

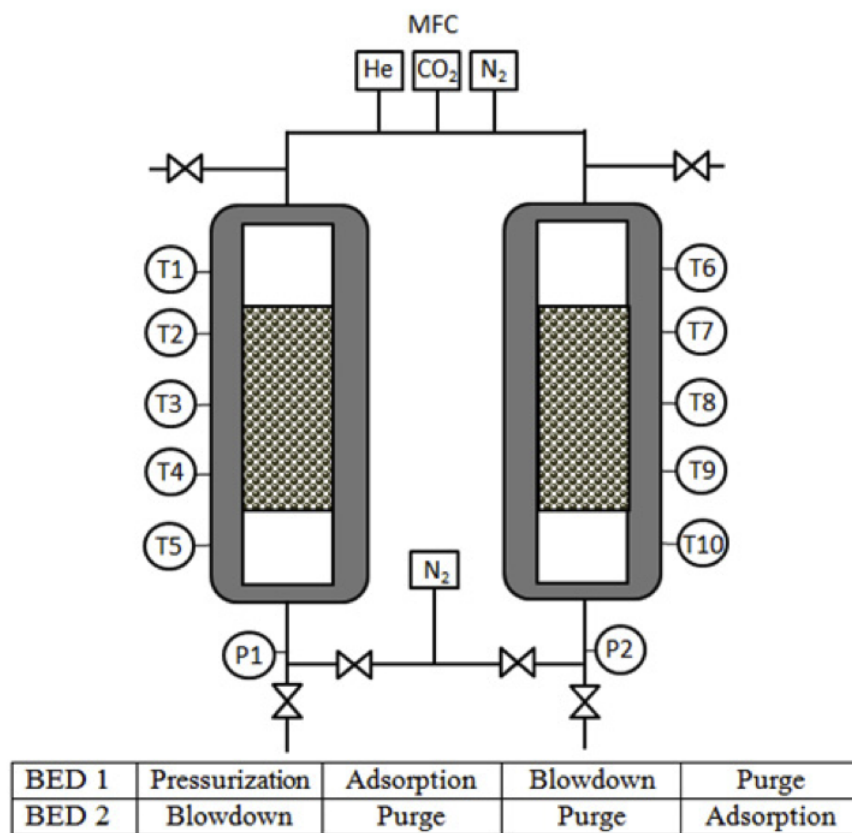


Figura 3.10: Esquema de un sistema de captura de CO_2 mediante PSA (Siqueira et al., 2017).

- Vacuum swing adsorption (VSA): es una derivación de PSA, en el que la adsorción ocurre a presión atmosférica y la desorción ocurre bajo vacío. A diferencia de PSA, no requiere de compresores, válvulas, y sistemas de filtración de aire. Al operar a presiones menores se reduce la condensación del agua, lo que permite implementar VSA en entornos húmedos y una mejor regeneración del sorbente.
- Pressure vacuum swing adsorption (PVSA): es una combinación de PSA y VSA, es decir,

la adsorción ocurre en un entorno presurizado y la desorción sucede mediante un vacío. La Figura 3.11 describe el proceso PVSA de forma esquemática. Este consiste de cinco pasos: presurización, adsorción, despresurización, evacuación y purga. Los primeros tres pasos ya fueron descritos anteriormente en la sección de PSA. La evacuación consiste en reducir la presión de la columna con una bomba de vacío, el CO_2 es desorbido. La etapa de purga permite obtener una mayor remoción del CO_2 remanente al alimentar un gas de purga (Zhao et al., 2017a).

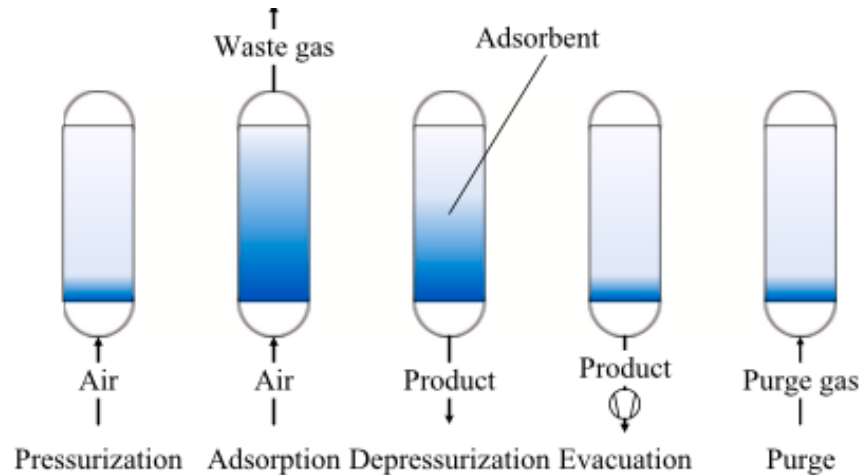


Figura 3.11: Diagrama de un sistema PVSA (Jiang et al., 2023).

- **Temperature swing adsorption (TSA):** la adsorción y desorción para este caso tienen lugar mediante el control de la temperatura de operación. La adsorción ocurre a temperatura ambiente, mientras que la desorción requiere de una temperatura mayor lo cual se relaciona con las propiedades de los adsorbentes. El ciclo funciona con 4 etapas: adsorción, precalentamiento, desorción y preenfriamiento. La Figura 3.12 describe esquemáticamente el sistema TSA. En la etapa de adsorción el aire ambiente entra a la columna y el CO_2 es adsorbido. A la vez, la chaqueta es enfriada con un fluido refrigerante para eliminar el calor de adsorción. En el precalentamiento la columna comienza a ser calentada progresivamente. Durante la desorción, la columna es calentada a una temperatura más alta. La desorción ocurre cuando la capacidad de adsorción de CO_2 es más alta que la capacidad máxima de adsorción a presión constante si la temperatura sigue aumentando. El CO_2 desorbido es concentrado por un gas de purga y abandona la columna. Por último, el preenfriamiento ocurre cuando el adsorbente está completamente regenerado, donde un fluido refrigerante es circulado por la chaqueta. Se reduce la temperatura y presión de la columna y se inicia un ciclo nuevamente (Jiang et al., 2018).

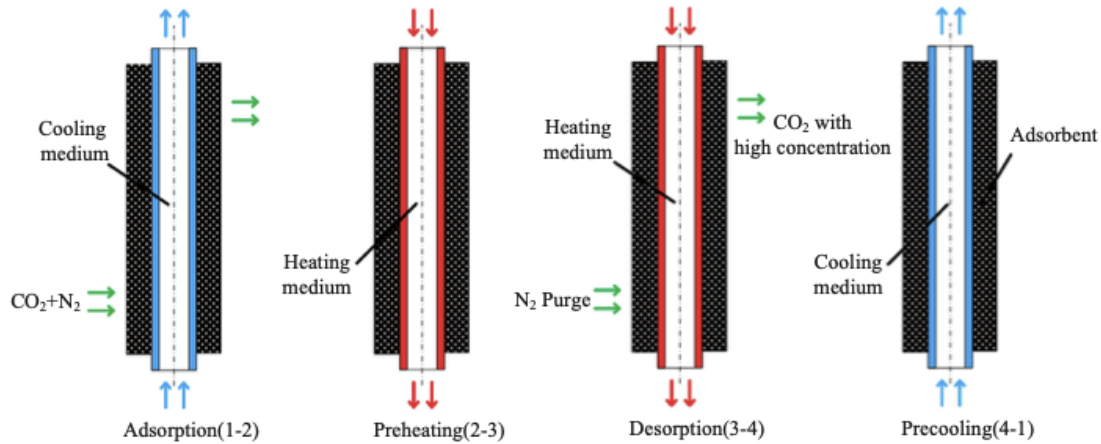


Figura 3.12: Esquema de un sistema TSA (Jiang et al., 2018).

- Electric swing adsorption (ESA): es una variante de TSA en la cual los adsorbentes son calentados directamente por una corriente eléctrica. ESA posee ventajas como una alta eficiencia de calentamiento y rápidas tasas de calor. Su falencia recae en su baja eficiencia térmica, la cual es un 20-25% menor a TSA y PSA (Ribeiro et al., 2012).
- Temperature vacuum swing adsorption (TVSA): combina la temperatura y el vacío, permitiendo una regeneración eficiente. Se destaca por la alta pureza del CO_2 que alcanza. El ciclo TVSA se compone de 5 etapas: presurización, adsorción, despresurización, calentamiento y enfriamiento. La Figura 3.13 presenta un diagrama esquemático de TVSA. Los primeros tres pasos son los mismos que los de la sección de PSA, mientras que los últimos dos son similares a los descritos en la sección de TSA. En concreto, durante la etapa de calentamiento el CO_2 es removido por el calor. Un gas de purga puede opcionalmente ser ingresado a la columna para remover el CO_2 remanente. El proceso de enfriamiento busca llevar la temperatura de la columna a temperatura ambiente (Jiang et al., 2023).

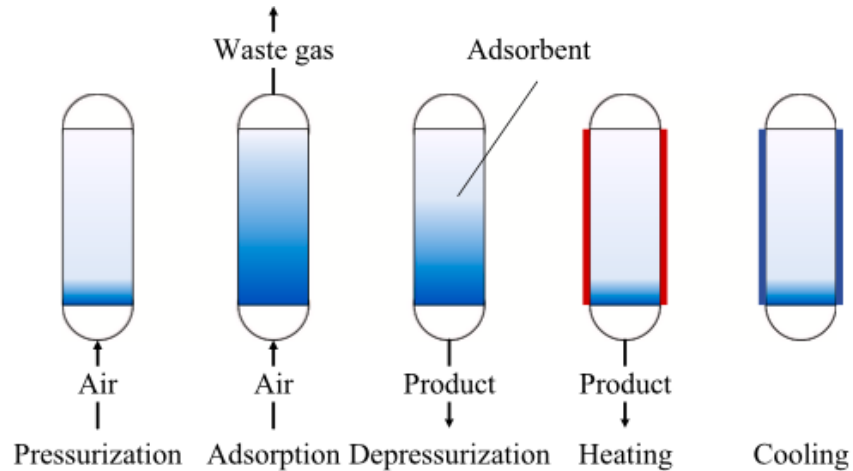


Figura 3.13: Diagrama de un sistema TVSA (Jiang et al., 2023).

Un estudio de Plaza et al. (2010) comparó diferentes ciclos de adsorción usando carbón activado en captura de CO_2 postcombustión, donde sus resultados de productividad y la recuperación de CO_2 desorbido fueron clasificadas mediante el siguiente orden: TVSA > VSA > TSA.

3.4.2 Materiales usados como sorbente

Considerando que la concentración de CO_2 en el aire es baja, el consumo energético de los sorbentes es relativamente alto y es determinado por el tipo de material, capacidad de adsorción y selectividad de CO_2 . Por ello, resulta clave la selección de un sorbente adecuado para DAC (Jiang et al., 2023).

Existen dos tipos de sorbentes en la adsorción: sorbentes físicos y sorbentes químicos. Los sorbentes físicos se caracterizan por utilizar fisisorción. En ella, representada esquemáticamente en la Figura 3.14, las moléculas de CO_2 son atraídas a la superficie de las paredes del poro dentro de un sorbente de gran área superficial por fuerzas de Van der Waals y tienen un calor de adsorción bajo, ligeramente mayor que el calor de sublimado del adsorbato. Los sorbente químicos, por otro lado, emplean quimisorción. Durante ella, el CO_2 sufre una reacción química covalente para unirse a ciertos sitios activos del sorbente con un calor de adsorción mayor, aproximadamente igual al calor de reacción (Berger and Bhowan, 2011).

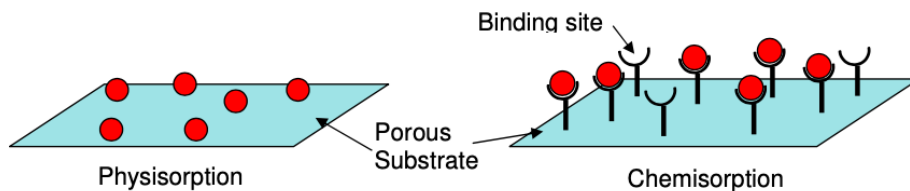


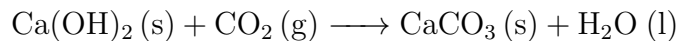
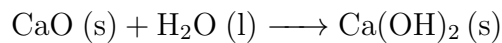
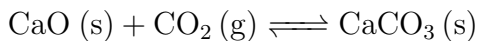
Figura 3.14: Representación esquemática de la fisisorción y la quimisorción (Berger and Bhowan, 2011).

Sorbentes físicos: Suelen consumir menos energía en comparación con los sorbentes químicos. Esto se debe a que los sorbentes físicos se sustentan en interacciones físicas más débiles (como las fuerzas de Van der Waals) y no generan enlaces nuevos entre sorbato y sorbente (Ben-Mansour et al., 2016).

- Zeolitas: Son aluminosilicatos microporosos con estructuras altamente ordenadas. A pesar de que presentan una buena selectividad hacia el CO₂, son tecnológicamente maduras y económicas, su desempeño se ve afectado en presencia de humedad, limitando su aplicación directa sobre el aire ambiente (Jiang et al., 2023).
- Carbón activado: Conocida por su bajo costo, gran área superficial, insensibilidad a humedad, estabilidad y bajos requerimientos energéticos para la regeneración (Kishibayev et al., 2021). Sin embargo, suele funcionar mejor a presiones altas, por lo que su baja capacidad de adsorción a presiones atmosféricas y su selectividad pobre de CO₂ y N₂ suelen ser limitantes para ser aplicada en DAC (Ben-Mansour et al., 2016).
- MOFs (Metal organic frameworks): Materiales cristalinos con alta área superficial y estructura altamente modificable. La adsorción de CO₂ con MOFs depende del tamaño/volumen de los poros y de la superficie. Algunos MOFs funcionalizados muestran buen desempeño para capturar CO₂, pero sus altos costos y su limitada estabilidad térmica y química siguen siendo un desafío para el escalado (Jiang et al., 2023).

Sorbentes químicos: A diferencia de los sorbentes físicos, la presencia de enlaces químicos entre sorbente y sorbato resulta en una mayor afinidad para capturar CO₂, lo que hace más llamativos a los sorbentes químicos (Wu et al., 2020).

- Sorbentes alcalinos sólidos: Basados en óxidos o hidróxidos de metales alcalinos (CaO, NaOH). Estos reaccionan con CO₂ para formar carbonatos o bicarbonatos en presencia de agua. Se basan en una reacción reversible de carbonatación-calcinación. La carbonatación ocurre entre 365 y 400 °C, mientras que la calcinación opera entre 800 y 875 °C. Se le agrega vapor de agua a la etapa de carbonatación para favorecer la conversión de la reacción, generando un producto intermedio Ca(OH)₂ (Nikulshina et al., 2007, 2009).



Son eficaces en la captura de CO₂, pero requieren temperaturas elevadas tanto para su operación como para la regeneración, lo que implica un mayor gasto energético.

- Sorbentes sólidos modificados con aminas: Consisten en materiales sólidos porosos (como alúmina, sílice o celulosa) funcionalizados con grupos amina primarias, secundarias o terciarias. Las aminas primarias y secundarias reaccionan con CO_2 y tienden a formar carbamatos o bicarbonatos, mientras que las aminas terciarias en presencia de agua forman bicarbonatos (Didas et al., 2012). Requieren de una baja temperatura para la regeneración, lo que resulta en un menor costo energético. Tienen una gran afinidad para enlazarse con el CO_2 y una gran tolerancia a la humedad, convirtiéndola en un sorbente atractivo (Barkakaty et al., 2017). La polietilénimina (PEI) es reportado como la amina más usada en los sorbentes modificados con aminas para aplicaciones DAC (Jiang et al., 2023). Young et al. (2021) considera a Lewatit VP OC 1065 como un ejemplo de un sorbente típico funcionalizado con aminas primarias y sugiere considerar a este sorbente como un benchmark para aplicaciones DAC. Esto debido a su disponibilidad comercial y porque se cree que es un sorbente similar al utilizado por Climeworks. Una imagen de este sorbente se adjunta en la Figura 3.15.



Figura 3.15: Sorbente Lewatit VP OC 1065 (LANXESS, 2024).

En la Figura 3.16 se presenta una imagen esquemática de los diversos sorbentes sólidos que son utilizados en la captura de CO_2 desde el aire.

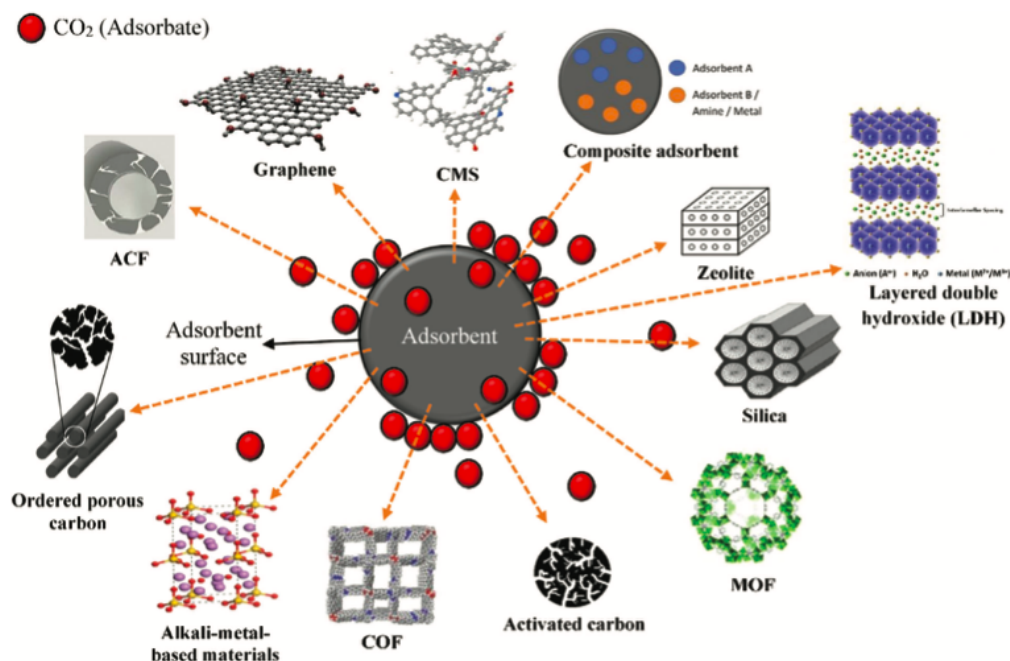


Figura 3.16: Distintos tipos de sorbentes sólidos para la captura de CO_2 (Lai et al., 2021).

3.4.3 Isotermas

Una forma común de describir el equilibrio de adsorción es mediante la relación entre la cantidad de soluto adsorbido y la presión (en el caso de gases o vapores) o la concentración en la fase líquida (para sistemas líquidos), manteniendo constante la temperatura. Esta representación se conoce como isoterma de adsorción para un sistema específico de adsorbato y adsorbente (Wood et al., 2018).

En la Figura 3.17 se presentan los tipos de isotermas de fisisorción. La IUPAC clasifica las isotermas de adsorción en seis tipos principales, los cuales reflejan diferentes mecanismos de adsorción en función de la estructura del sólido y la interacción con el adsorbato (Sing, 1985):

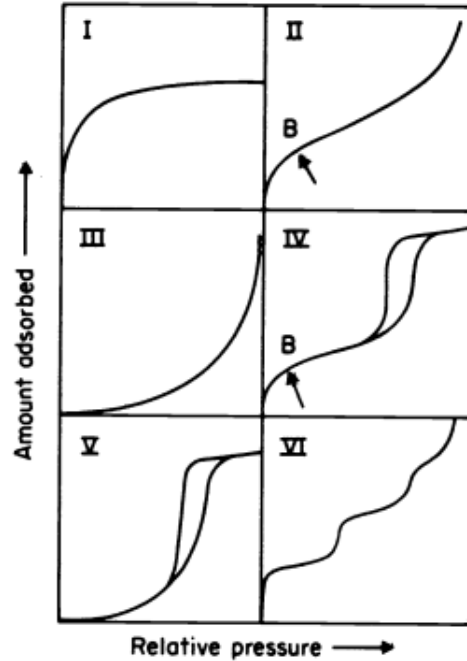


Figura 3.17: Tipos de isothermas de fisisorción (Sing, 1985).

- **Tipo I:** Presenta una forma cóncava respecto al eje de presión relativa (P/P^0) y alcanza un valor límite al acercarse a $P/P^0 = 1$. Es característica de materiales microporosos como carbones activados, zeolitas y ciertos óxidos porosos. Representa una adsorción en monocapa, donde la cantidad adsorbida está limitada por el volumen de microporos accesibles.
- **Tipo II:** Es la forma típica de isoterma observada en sólidos no porosos o macroporosos. Describe una adsorción monocapa-multicapa sin restricción, y su punto de inflexión (punto B) indica el inicio de la formación de multicapa. Es comúnmente utilizada para caracterizar la superficie específica de adsorbentes.
- **Tipo III:** Tiene una forma convexa en todo el rango de presión relativa y no presenta un punto B definido. Indica una baja afinidad entre adsorbente y adsorbato, siendo menos frecuente. Las interacciones adsorbato-adsorbato dominan sobre las interacciones con la superficie del sólido.
- **Tipo IV:** Se caracteriza por presentar un bucle de histéresis (fenómeno en el cual el proceso de desorción no sigue el mismo camino que el de adsorción), asociado a la condensación capilar en mesoporos. La parte inicial de la isoterma sigue el mismo comportamiento que una Tipo II, indicando adsorción en monocapa y multicapa. Es típica de materiales mesoporosos como la sílice o alúmina mesoporosa.

- **Tipo V:** Similar a la Tipo III en cuanto a la débil interacción entre adsorbente y adsorbato, pero aparece en materiales porosos. También puede presentar histéresis y es menos común, asociada a interacciones específicas en sistemas de poros.
- **Tipo VI:** Representa una adsorción multicapa escalonada sobre superficies uniformes y no porosas. Cada escalón corresponde a la formación de una nueva capa de adsorbato. Se observa, por ejemplo, en la adsorción de argón o criptón sobre negros de humo grafitados a temperatura de nitrógeno líquido.

A continuación, se presentan algunas isothermas, junto a su descripción, ecuación y nomenclatura correspondientes (Wood et al., 2018).

- **Isoterma lineal:** Es el modelo más simple, basado en la Ley de Henry. Se asume que la cantidad adsorbida es directamente proporcional a la concentración del soluto en la fase líquida o a la presión parcial en fase gaseosa. Se expresa como:

$$q = K_H C$$

donde q es la cantidad adsorbida, C la concentración en fase líquida y K_H la constante de Henry. Esta isoterma es válida sólo a bajas concentraciones o presiones.

- **Isoterma de Langmuir:** Supone una superficie homogénea con un número finito de sitios de adsorción equivalentes y sin interacciones entre las moléculas adsorbidas. Es adecuada para describir adsorción en monocapa. Su forma general es:

$$q = \frac{q_m b C}{1 + b C}$$

donde q_m es la capacidad máxima de adsorción (monocapa), b es la constante de afinidad y C la concentración en la fase líquida.

- **Isoterma de Freundlich:** Modelo empírico utilizado para sistemas heterogéneos. No predice un límite de saturación y es útil para representar adsorción en superficies con energía variable. Se expresa como:

$$q = K_F C^{1/n}$$

donde K_F y n son parámetros empíricos relacionados con la capacidad y la intensidad de la adsorción, respectivamente.

- **Isoterma de Sips (Langmuir-Freundlich):** Combina las características de Langmuir y Freundlich, siendo útil para describir adsorción en superficies heterogéneas con comportamiento

limitado a una monocapa. Su expresión es:

$$q = \frac{q_m (bC)^n}{1 + (bC)^n}$$

donde n refleja el grado de heterogeneidad del sistema. Para $n = 1$, la ecuación se reduce a la isoterma de Langmuir.

- **Isoterma de Brunauer–Emmett–Teller (BET):** Extiende el modelo de Langmuir al caso de adsorción en múltiples capas. Es comúnmente utilizada en la caracterización de áreas superficiales específicas. Su forma más utilizada es:

$$q = \frac{q_m C B}{(1 - C)(1 + (B - 1)C)}$$

donde B es un parámetro relacionado con la energía de adsorción y C la presión relativa en el caso de gases. Este modelo se aplica principalmente a sólidos no porosos o mesoporosos.

- **Isoterma de Toth:** Es una modificación empírica de Langmuir que mejora el ajuste en sistemas heterogéneos y conserva un límite de saturación a altas concentraciones. Su forma es:

$$q = \frac{q_m b C}{(1 + (bC)^t)^{1/t}}$$

donde t es un parámetro de ajuste que refleja la heterogeneidad del sistema. Para $t = 1$, se recupera la isoterma de Langmuir.

En la Figura 3.18 se presenta un resumen de cómo se ve el comportamiento de algunas isotermas.

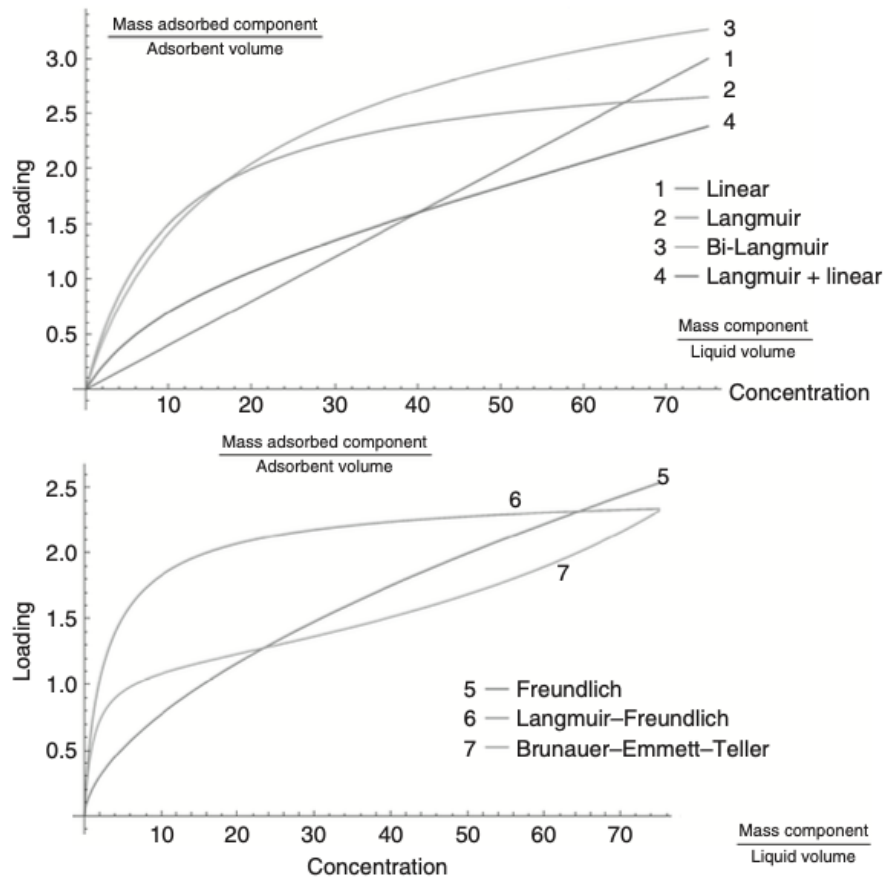


Figura 3.18: Comportamiento de diferentes curvas de isotermas en caso monocomponente (Wood et al., 2018).

3.5 Aplicabilidad geográfica y operativa en contextos internacionales

La aplicación de DAC depende fuertemente de factores geográficos y climáticos como la temperatura y la humedad relativa. Estos factores afectan a la productividad del proceso, el costo energético y, por ende, el costo nivelado de captura (LCOD). Las condiciones ambientales del aire varían a lo largo del planeta, con tendencias que varían día a día o por temporada, según sea el caso (Young et al., 2021). Un estudio de Sendi et al. (2022b) estudió el rendimiento de S-DAC en función del clima y la ubicación geográfica, para así encontrar la ubicación ideal a nivel técnico y económico. Evaluaron dos configuraciones de ciclo adsorptivo con materiales tipo amina funcionalizada (Lewatit VP OC 1065): el ciclo VTSA (*vacuum-temperature swing adsorption*) y el ciclo SA-VTSA (VTSA con purga de vapor). A través de simulaciones detalladas con modelos 1D y 2D, acopladas a datos climáticos globales de alta resolución (NASA MERRA-2), los autores identificaron zonas geográficas

con mayor potencial para implementación de DAC basado en sorbentes sólidos. En su trabajo, se definieron 4 condiciones diferentes en función de la temperatura y la humedad relativa: cálido y húmedo, cálido y seco, frío y húmedo y frío y seco. La condición de cálido o frío se define si la temperatura media anual se encuentra por sobre o por debajo de los 18 °C, respectivamente. Por otro lado, la condición de húmedo o seco se cumple cuando la humedad relativa media anual está por sobre o por debajo del 65%, respectivamente. En la Figura 3.19 se puede ver un resumen global de las regiones con las características mencionadas anteriormente.

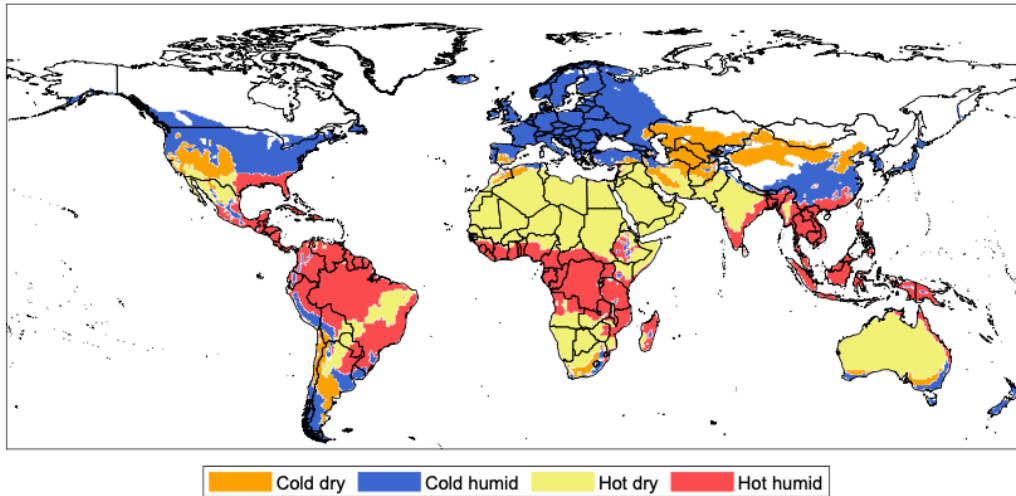


Figura 3.19: Regiones del mundo y su clasificación según temperatura y humedad relativa (Sendi et al., 2022b).

Se halló que la productividad de los colectores DAC tiene una fuerte relación con la humedad relativa y la temperatura, mientras que el requerimiento eléctrico depende más fuertemente de solo la humedad relativa. En concreto, las conclusiones del trabajo son las siguientes:

- **Zonas frías**, donde la temperatura no baja de -15°C por largos períodos del año, tienden a ofrecer **mayor productividad**, debido a la mejora en la capacidad de adsorción de CO_2 a bajas temperaturas.
- **Zonas secas**, con humedad relativa entre 20–60 %, presentan **menores requerimientos energéticos**, ya que el exceso de humedad compite con el CO_2 por los sitios activos del sorbente y aumenta la carga térmica del sistema.
- La adición de una etapa de **purga con vapor** (SA-VTSA) permite reducir el LCOD hasta en un 15 % en climas cálidos y secos, debido a una regeneración más eficiente del sorbente.

En la Figura 3.20 se puede ver una gráfica que representa el rendimiento del proceso TVSA a diferentes temperaturas y humedades relativas. Es posible notar que se alcanza una mayor

productividad y menores costos eléctricos en los puntos de menor temperatura y menor humedad relativa, es decir, en zonas frías y secas.

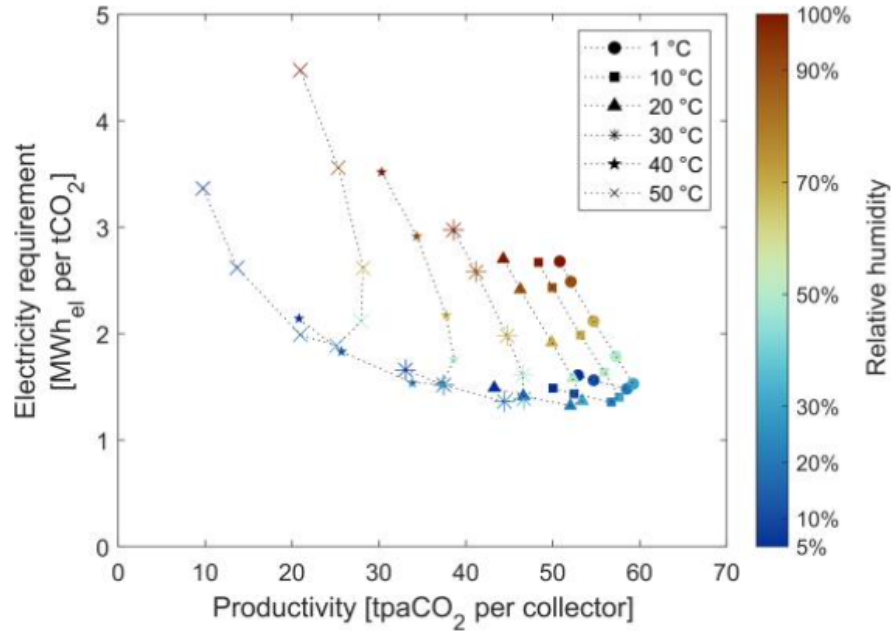


Figura 3.20: Rendimiento del proceso TVSA a diferentes temperaturas y humedades relativas (Sendi et al., 2022a).

En términos económicos, el costo nivelado de captura (LCOD) para el ciclo VTSA se encuentra en el rango de 348–603 USD por tonelada de CO₂, dependiendo de la región y el precio de la electricidad. El SA-VTSA logra una mejora económica particularmente significativa en regiones cálidas y secas (Sendi et al., 2022a).

3.6 Investigación en curso en Chile sobre captura directa

En diciembre de 2024, HIF Global anunció la llegada de la primera unidad de captura directa de aire en Chile. La unidad de prueba fue desarrollada por HIF Global en asociación con Porsche, Volkswagen Group Innovation y MAN Energy Solutions. Se instalará en las instalaciones de Haru Oni y se integrará por primera vez en la producción de combustibles sintéticos. Las piezas del equipo ya están en Punta Arenas y ya se está trabajando en su ensamblaje, el cual se proyecta que esté finalizado el primer trimestre de 2025. Esta unidad permitirá filtrar del aire 600 toneladas de CO₂ al año. Actualmente, Haru Oni utiliza CO₂ biogénico para producir e-fuels. Esta unidad tiene la capacidad de absorber humedad atmosférica, de la que se puede extraer el agua y luego ser utilizada en los procesos de producción de los e-fuels. Los e-fuels se fabrican al separar el hidrógeno del oxígeno presentes en la molécula de agua utilizando electrolizadores alimentados por

energías renovables. Luego, el hidrógeno se combina con dióxido de carbono reciclado para producir combustibles sintéticos, que son químicamente similares a los combustibles usados en la actualidad. Esto implica que pueden incorporarse a los motores e infraestructura existentes sin necesidad de grandes modificaciones (HIF Global, 2024).

Más allá de este desarrollo tecnológico industrial en el extremo sur, el ecosistema científico nacional también ha comenzado a generar líneas de investigación complementarias sobre el ciclo del carbono en entornos costeros, destacando los esfuerzos de monitoreo de flujos atmósfera-océano desarrollados por el Instituto SECOS (Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID), 2023). Si bien estas iniciativas basadas en la naturaleza no constituyen tecnologías DAC en sentido estricto, su avance permite consolidar capacidades analíticas y bases de datos locales que facilitarán, en el futuro, evaluar el impacto integrado de la implementación de tecnologías de remoción de dióxido de carbono (CDR) en el balance de carbono a nivel nacional.

3.7 Fundamentos Teóricos de la Adsorción en Lecho Fijo

El modelado dinámico de procesos de captura de CO₂ requiere una descripción rigurosa de los fenómenos de equilibrio termodinámico, cinética de transferencia de masa y transporte de materia a través del lecho poroso. A continuación, se presentan las ecuaciones gobernantes que describen estos fenómenos para el sistema CO₂-Amina sólida. El desarrollo matemático detallado de estos balances a partir de primeros principios se encuentra disponible en el Anexo A.

3.7.1 Equilibrio de Adsorción: Isoterma de Toth

La capacidad máxima de captura del sorbente está determinada por el equilibrio termodinámico entre la fase gas y la superficie sólida. Para sorbentes funcionalizados con aminas, que presentan heterogeneidad energética en sus sitios activos, el comportamiento de equilibrio se describe adecuadamente mediante la isoterma de Toth dependiente de la temperatura (Young et al., 2021):

$$q_{CO_2}^*(T, p_{CO_2}) = n_s(T) \cdot \frac{b(T) \cdot p_{CO_2}}{\left(1 + (b(T) \cdot p_{CO_2})^{t(T)}\right)^{1/t(T)}} \quad (3.1)$$

$$(3.2)$$

Donde q^* es la carga de equilibrio [mol/kg], p_{CO_2} es la presión parcial, y los parámetros n_s , b y t dependen de la temperatura según relaciones tipo Arrhenius, permitiendo predecir la capacidad de carga tanto en la etapa de adsorción (baja temperatura) como en la regeneración (alta temperatura).

3.7.2 Cinética de Transferencia de Masa: Modelo Dual-Site

La velocidad con la que el CO_2 se transfiere desde la fase gas hacia los sitios activos no es instantánea. En sorbentes de aminas soportadas, la difusión ocurre a través de dos mecanismos principales: adsorción rápida en la superficie y difusión lenta en la capa profunda de amina. Para capturar este comportamiento, se emplea el modelo de Doble Sitio (*Dual-Site Driving Force*) (Petersen et al., 2026):

La velocidad de adsorción total es la suma de las contribuciones de dos tipos de sitios:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial q_1}{\partial t} + \frac{\partial q_2}{\partial t} \quad (3.3)$$

Cada sitio sigue una cinética de fuerza impulsora lineal, pero con coeficientes de transferencia de masa distintos:

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} = k_1(\eta q^* - q_1) \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} = k_2((1 - \eta)q^* - q_2) \quad (3.5)$$

Donde η representa la fracción de sitios rápidos accesibles directamente y q^* es la carga de equilibrio. El coeficiente global k_2 incorpora la resistencia adicional de la capa de amina (k_{amine}) según la relación de resistencias en serie:

$$\frac{1}{k_2} = \frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_{amine}} \quad (3.6)$$

Uniando las ecuaciones 3.3, 3.4 y 3.5 se llega a:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = k_1(\eta q^* - q_1) + k_2((1 - \eta)q^* - q_2) \quad (3.7)$$

Este modelo supera las limitaciones del modelo LDF convencional al incorporar dos coeficientes de transferencia (k_1 y k_2) y un factor de distribución de sitios η , lo que permite representar con mayor fidelidad las largas colas de desorción observadas experimentalmente.

Para visualizar la interacción entre estos fenómenos, la Figura 3.21 presenta un esquema multiescala del sistema en cuestión. En él se aprecia cómo el modelo matemático debe acoplar el transporte convectivo a través de los vacíos del lecho (nivel macroscópico) con los mecanismos difusivos que ocurren al interior de la estructura porosa de los pellets (nivel microscópico), donde reside la resistencia cinética descrita por el modelo *Dual-Site*.

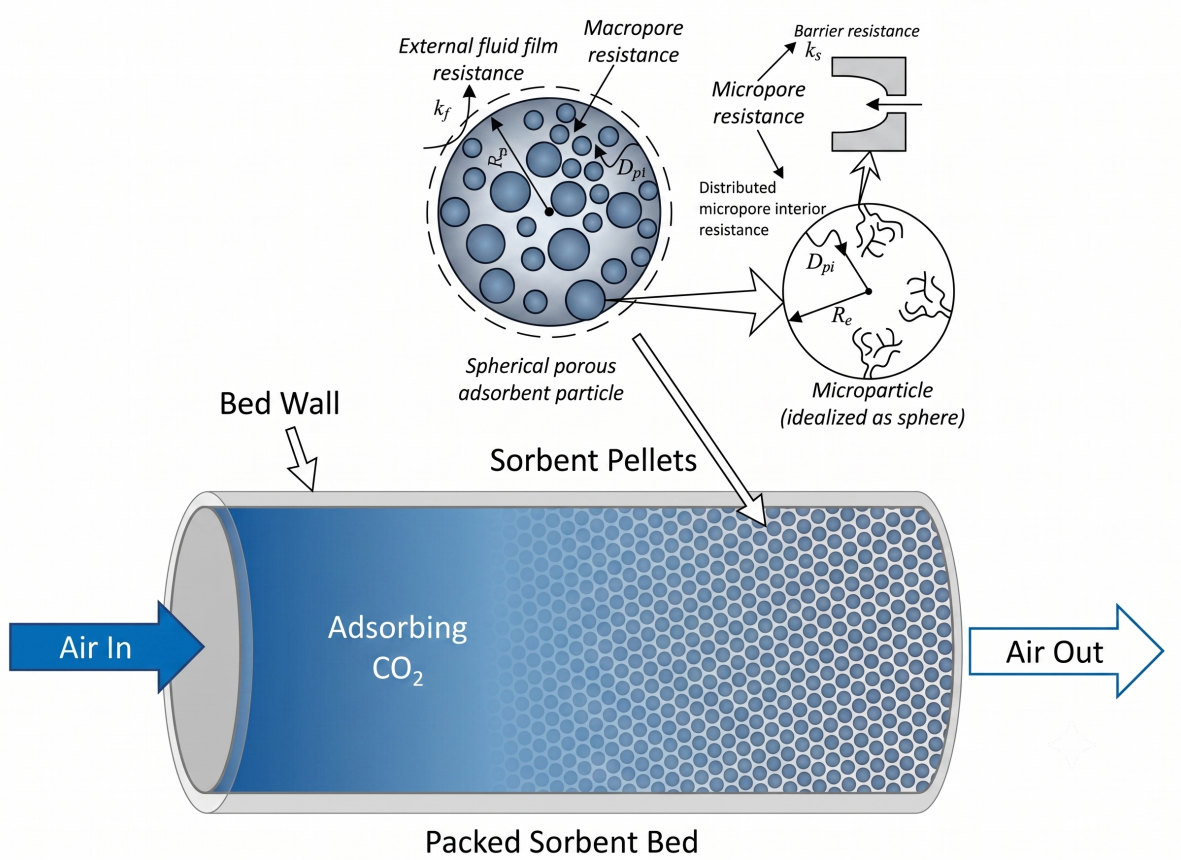


Figura 3.21: Esquema de lecho empacado para adsorción de CO₂. Adaptado de Shafeeyan et al. (2014).

3.7.3 Dinámica Macroscópica de la Columna

El comportamiento del reactor de lecho fijo se modela asumiendo flujo pistón con dispersión axial. El balance de masa para el CO₂ en la fase gas, expresado en términos de fracción molar (y_{CO_2}) para un sistema isobárico, está dado por:

$$\frac{\partial y_{CO_2}}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 y_{CO_2}}{\partial z^2} - v \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial z} - \frac{RT}{P\epsilon_b} (1 - \epsilon_b) \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (3.8)$$

Donde D_L es el coeficiente de dispersión axial, v la velocidad intersticial del gas y ϵ_b la porosidad del lecho. Esta ecuación diferencial parcial acopla el transporte convectivo-dispersivo con la velocidad de adsorción $\partial q / \partial t$ definida por el modelo cinético.

Capítulo 4

Materiales y Métodos

En este capítulo se detallan los materiales, herramientas computacionales, criterios de selección y procedimientos a utilizar para simular el proceso de captura directa de CO₂ en condiciones representativas de Chile. El enfoque combina la selección de una tecnología basada en sorbentes sólidos, la evaluación climática de una zona del norte de Chile y la implementación de un modelo de columna de lecho fijo en MATLAB versión R2024b.

El desarrollo de esta investigación se estructuró en un flujo de trabajo secuencial dividido en tres fases principales, asegurando que los resultados económicos finales estén sustentados en una base técnica validada (ver Figura 4.1).

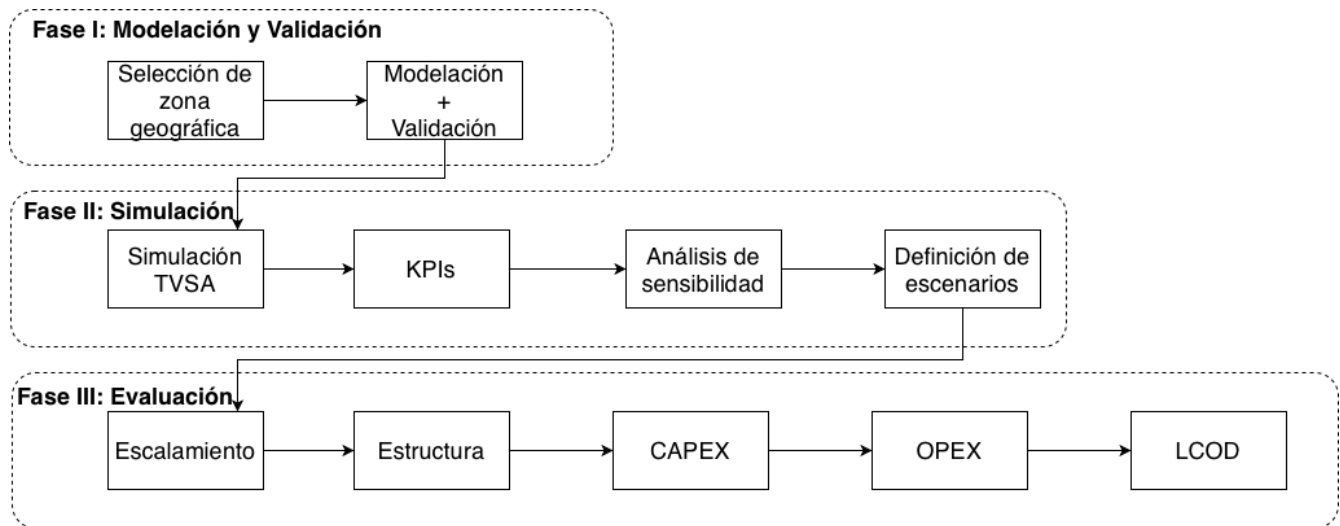


Figura 4.1: Diagrama de flujo metodológico secuencial que detalla las etapas de análisis técnico en MATLAB y la posterior evaluación económica.

1. **Fase I: Modelación y Validación Fenomenológica.** Se desarrolló un modelo matemático dinámico en MATLAB capaz de representar los fenómenos de transporte y cinética de adsorción

en un lecho fijo. Este modelo fue calibrado y validado utilizando datos experimentales reportados en la literatura para el sorbente de referencia.

2. **Fase II: Simulación de Ciclos.** Una vez validado el modelo, se implementó un ciclo de adsorción por cambio de temperatura y vacío (TVSA). Se realizó un análisis de sensibilidad paramétrico para definir escenarios operativos (casos A, B y C) y se procedió al dimensionamiento de módulos industriales para distintas capacidades de captura.
3. **Fase III: Escalamiento y Evaluación Tecno-Económica.** A partir de los balances de masa y energía obtenidos en la simulación, se estimaron los costos de capital (CAPEX) y operación (OPEX) para determinar el Costo Nivelado de Captura (LCOD) bajo diferentes incertidumbres económicas.

4.1 Selección de tecnología DAC y zona geográfica

Para este trabajo se optó por estudiar una tecnología S-DAC basada en sorbentes sólidos funcionalizados con grupos amina en configuración TVSA. Esta decisión se debe a que en estudios recientes se ha demostrado que S-DAC supera a L-DAC en términos de demanda de exergía, análisis del ciclo de vida y mayor flexibilidad operacional (Sabatino et al., 2021), tal como se discutió en la sección de Estado del Arte.

De acuerdo con lo reportado por Sendi et al. (2022b), las regiones frías y secas presentan condiciones favorables para la implementación de tecnologías S-DAC, especialmente en configuraciones TVSA. Además, la única instancia de aplicación real de DAC en Chile hoy es la planta de HIF Global Haru Oni en la zona austral. Por ello, se decidió acotar el análisis al norte de Chile, al ser una zona que combina condiciones climáticas adecuadas con una creciente infraestructura industrial y energética. Representa una zona novedosa y ventajosa técnicamente para explorar la viabilidad de DAC en Chile. Según el mapa reportado por Sendi et al. (2022a) en la Figura 3.19, el norte de Chile es catalogado, precisamente, como una región fría y seca.

Para la selección de una zona representativa, se definieron criterios tanto climáticos como logísticos e industriales, reconociendo que, a escala industrial, la viabilidad de un sistema DAC no depende únicamente de las condiciones ambientales, sino también de factores asociados a la integración energética, disponibilidad de infraestructura y facilidades operacionales. Los criterios considerados fueron los siguientes:

- Temperatura media anual: entre 5 y 20 °C
- Humedad relativa media: inferior al 60%
- Velocidad del viento: promedio o superior a 2 m/s

- Acceso a energía solar o térmica
- Disponibilidad de infraestructura industrial y logística

Se seleccionaron tres zonas potenciales con características climáticas y logísticas interesantes para DAC, todas ubicadas en la región de Antofagasta:

- i. Sierra Gorda
- ii. Ollagüe
- iii. Mejillones

A partir de los criterios definidos anteriormente y de las zonas a estudiar, se construyó una matriz de selección multicriterio, ponderando la temperatura, la humedad relativa, la velocidad del viento y la accesibilidad energética y logística. Cada criterio fue evaluado en una escala de 1 a 5 según su compatibilidad con las condiciones óptimas para la operación de un sistema TVSA. En particular, se otorgó un mayor peso a los criterios de infraestructura y acceso energético, dada su influencia directa en el escalamiento, operación continua y costos del sistema. Los resultados se presentan en la Tabla 4.1.

El puntaje total de cada zona se calculó como una suma ponderada de los criterios evaluados, de acuerdo con la siguiente expresión:

$$S = \sum_{i=1}^n w_i \cdot s_i \quad (4.1)$$

donde s_i corresponde al puntaje asignado al criterio i (en una escala de 1 a 5) y w_i representa la ponderación relativa de dicho criterio, normalizada de modo que $\sum w_i = 1$.

Tabla 4.1: Matriz de selección ponderada de zonas para simulación DAC.

Zona	Temp	HR	Viento	Energía	Logística	Puntaje total
Ponderación (%)	15	15	20	25	25	100
Sierra Gorda	5	5	4	4	3	3,95
Ollagüe	4	5	3	4	2	3,45
Mejillones	3	3	5	5	5	4,30

Al aplicar la ponderación de criterios, la zona de Mejillones obtuvo el mayor puntaje global. Si bien presenta condiciones climáticas ligeramente menos favorables que las zonas interiores del desierto, Mejillones destaca por su acceso directo a infraestructura industrial, disponibilidad energética, conectividad logística y cercanía a instalaciones portuarias, factores clave para la implementación y escalamiento de tecnologías DAC a nivel industrial.

En consecuencia, Mejillones fue seleccionada como la zona base para la simulación del proceso de captura directa de CO₂ desarrollada en este trabajo.

4.2 Modelación matemática en MATLAB

La simulación del proceso de captura se realizó mediante un modelo fenomenológico unidimensional (1D) no estacionario, implementado en el entorno de programación MATLAB. El modelo describe la dinámica de adsorción de CO₂ en una columna de lecho empacado, considerando dispersión axial y resistencia a la transferencia de masa. Para ello, se resuelven los balances de materia y cinética descritos en los Fundamentos Teóricos (sección 3.7).

4.2.1 Supuestos

Para reducir la complejidad computacional sin sacrificar la representatividad física del fenómeno de captura de CO₂, se adoptaron las siguientes simplificaciones:

- Modelo unidimensional con dispersión axial únicamente, sin considerar dispersión radial.
- Propiedades del gas se consideran constantes.
- El sistema se comporta como un gas ideal.
- El proceso se considera isotérmico e isobárico en la etapa de adsorción. Esta simplificación es físicamente válida a escala de laboratorio debido a la rápida disipación del calor de adsorción ($\Delta H = 72,8 \text{ kJ/mol}$) hacia el entorno en columnas pequeñas. En cuanto al escalamiento industrial, se asume que el diseño modular incorpora sistemas de gestión térmica que aseguran la estabilidad de la temperatura operacional, por lo cual el lecho no presenta un comportamiento adiabático.
- Sólo se adsorbe CO₂. Esto implica que se desprecia la adsorción competitiva de agua, modelando el sistema con aire seco. Esto permite aislar y validar la cinética intrínseca del CO₂ sobre la amina.
- El lecho se considera homogéneo en términos de porosidad y distribución de tamaño de partícula.

4.2.2 Ecuaciones y Resolución Numérica

La estrategia de simulación consistió en resolver el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas presentadas en el Estado del Arte:

1. **Transporte en el Lecho:** Se resolvió la Ecuación (3.8) para la fracción molar de CO_2 .
2. **Equilibrio Termodinámico:** Se implementó la isoterma de Toth según la Ecuación (3.2), incorporando la dependencia térmica de los parámetros n_s , b y t . En concreto, las ecuaciones consideradas son las siguientes (Young et al., 2021):

$$n_s(T) = n_{s_0} \cdot \exp \left(\chi \left(1 - \frac{T}{T_0} \right) \right) \quad (4.2)$$

$$(4.3)$$

$$b(T) = b_0 \cdot \exp \left(\frac{\Delta H_0}{RT_0} \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) \right) \quad (4.4)$$

$$(4.5)$$

$$t(T) = t_0 + \alpha \cdot \left(1 - \frac{T_0}{T} \right) \quad (4.6)$$

Donde:

- $n_s(T)$: Capacidad máxima de adsorción a temperatura T [mol/kg]
- $b(T)$: Constante de afinidad a temperatura T [Pa^{-1}]
- $t(T)$: Factor de heterogeneidad de la superficie a temperatura T [-]
- n_{s_0} : Capacidad máxima de adsorción a temperatura de referencia T_0 [mol/kg]
- χ : Parámetro empírico de corrección de temperatura para $n_s(T)$ [-]
- b_0 : Constante de afinidad a T_0 [Pa^{-1}]
- ΔH_0 : Entalpía de adsorción (negativa para procesos exotérmicos) [J/mol]
- t_0 : Valor base del exponente de Toth [-]
- α : Coeficiente de sensibilidad térmica de $t(T)$ [-]
- T_0 : Temperatura de referencia [K]
- R : Constante universal de los gases [J/mol·K]

3. **Cinética de Captura:** Se utilizó el modelo *Dual-Site* (Ecuación 3.7), ajustando los coeficientes de transferencia k_1 y k_2 para reproducir las curvas de ruptura experimentales.

El sistema de Ecuaciones Diferenciales Parciales (EDP) se discretizó espacialmente utilizando el Método de Líneas (MOL) con un esquema de diferencias finitas centradas de segundo orden sobre una malla de $N = 100$ nodos. El sistema resultante de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

(EDO) rígidas se integró en el tiempo utilizando el solver `ode15s` de MATLAB. Se implementaron las condiciones de frontera de Danckwerts: flujo dispersivo a la entrada ($z = 0$) y gradiente nulo a la salida ($z = L$).

4.3 Validación del modelo

Con el objetivo de asegurar la confiabilidad de los resultados y las predicciones del modelo, en esta sección se detalla la validación de este último; contrastando los resultados de la simulación con los datos experimentales reportados por Petersen et al. (2026).

4.3.1 Parámetros del Caso Base

Los parámetros físicos, de transporte y de equilibrio utilizados para alimentar el modelo corresponden al sorbente comercial Lewatit® VP OC 1065 y a la configuración experimental reportada por Petersen et al. (2026). La Tabla 4.2 resume los valores utilizados en la simulación, incluyendo características fisicoquímicas del material, las dimensiones del lecho y las condiciones operacionales base utilizadas para la validación.

Tabla 4.2: Propiedades del sistema y condiciones de operación del Caso Base (Petersen et al., 2026).

Categoría	Parámetro	Símbolo	Valor
Material Sorbente	Nombre Comercial	-	Lewatit® VP OC 1065
	Matriz Polimérica	-	Poliestireno-DVB reticulado
	Grupo Funcional	-	Amina primaria (bencilamina)
Propiedades de la Partícula	Diámetro de partícula	d_p	$7,25 \times 10^{-4}$ m
	Densidad de partícula	ρ_p	747 kg/m ³
	Porosidad intrapartícula	ε_p	0,338
	Tortuosidad	τ	3,0
	Radio promedio de poro	r_{poro}	$1,19 \times 10^{-6}$ cm
Propiedades del Lecho	Longitud del lecho	L_b	0,019 m
	Radio interno del lecho	r_b	0,0023 m
	Porosidad del lecho	ε_b	0,36
	Densidad del lecho (bulk)	ρ_{bulk}	478 kg/m ³
	Masa de sorbente	m_{ads}	0,1510 g
Operación Adsorción	Temperatura	T_{ads}	30 °C
	Presión	P_{ads}	1,013 bar
	Concentración entrada	y_{in}	400 ppm CO ₂
	Caudal de alimentación	Q_{in}	50 cm ³ /min
	Velocidad superficial	u_g	0,10 m/s
Referencia Equilibrio	Carga de equilibrio (400 ppm)	q_{400}^*	0,715 mol/kg
Operación Desorción	Temperatura	T_{des}	100 °C
	Presión de Vacío	P_{vac}	0,30 bar

4.3.2 Validación de la isoterma de adsorción

En primera instancia, se verificó el ajuste de la isoterma de Toth a los datos de capacidad de equilibrio. Se utilizaron los parámetros termodinámicos listados en la Tabla 4.3, los cuales incorporan la dependencia térmica necesaria para simular el ciclo TVSA completo.

Tabla 4.3: Parámetros de la Isotherma de Toth utilizados en la simulación (Petersen et al., 2026).

Parámetro	Símbolo	Valor
Capacidad de saturación (T_0)	n_{s0}	3,1 mol/kg
Afinidad (T_0)	b_0	$1,22 \times 10^4 \text{ bar}^{-1}$
Exponente de heterogeneidad (T_0)	t_0	0,326
Entalpía de adsorción	ΔH	72,8 kJ/mol
Temperatura de referencia	T_0	303,15 K
Parámetro térmico χ	χ	6,44
Parámetro térmico α	α	1,88

La Figura 4.2 presenta la comparación entre el modelo y los datos experimentales, demostrando que los parámetros seleccionados reproducen adecuadamente la capacidad de carga (q^*) en el rango de bajas presiones característico de DAC. Se consideran 4 sets de datos: a 303 K (30 °C), 323 K (50 °C), 343 K (70 °C) y 363 K (90 °C).

Se realizó un análisis de desvíos estadísticos a partir de los datos experimentales adaptados de Petersen et al. (2026). Los indicadores de bondad de ajuste evaluados corresponden a la Suma de Errores al Cuadrado (SSE), el Error Cuadrático Medio (MSE) y la Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE), calculados mediante la interpolación lineal de los perfiles numéricos en las coordenadas de presión experimental. Los resultados para cada isoterma de temperatura se consolidan en la Tabla 4.4.

Tabla 4.4: Indicadores estadísticos de validación para las isotermas de adsorción de CO₂.

Temperatura [K]	Puntos (N)	SSE	MSE	RMSE [mol/kg]	NRMSE (%)
303,15 (30 °C)	33	0,09154	0,00277	0,05267	3,54
323,15 (50 °C)	24	0,00935	0,00039	0,01974	1,89
343,15 (70 °C)	14	0,01254	0,00090	0,02993	5,06
363,15 (90 °C)	5	0,00523	0,00105	0,03233	18,44

Los indicadores mostrados en la Tabla 4.4 confirman que el modelo termodinámico posee una importante capacidad predictiva. Para las curvas de operación regular (303,15 a 343,15 K), el error cuadrático medio normalizado (NRMSE) se sitúa consistentemente por debajo del 5,1%, lo que indica un ajuste de alta fidelidad. Para condición extrema de desorción (363,15 K), se observa

un NRMSE del 18,44%; cabe destacar que este incremento porcentual relativo es un artefacto matemático derivado de la normalización ante magnitudes de carga remanente asintóticas a cero ($\sim 0,03$ mol/kg), donde desviaciones absolutas marginales, del orden de las milésimas, distorsionan el indicador relativo sin comprometer la validez del balance global de masa del sistema.

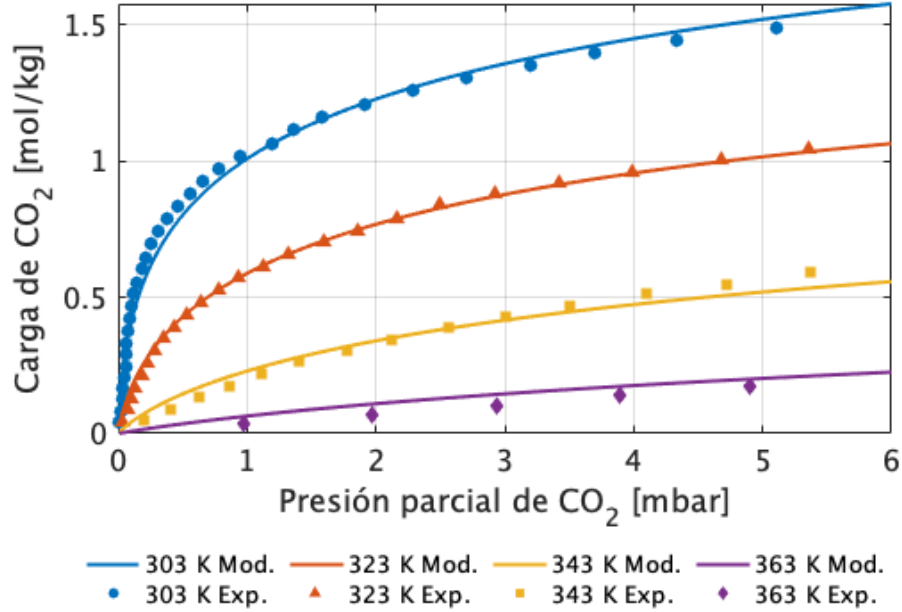


Figura 4.2: Validación de la isoterma de adsorción de CO_2 sobre Lewatit VP OC 1065 a distintas temperaturas.

4.3.3 Validación de la curva de ruptura de adsorción

La validación cinética se realizó reproduciendo la curva de ruptura experimental a 30°C . Inicialmente, se consideró el desempeño utilizando los parámetros cinéticos reportados por Petersen et al. (2026). Sin embargo, estos parámetros generaban discrepancias significativas respecto a la curva experimental digitalizada. Es por ello que se implementó un modelo iterativo que hallara los parámetros cinéticos que mejor describan el sistema. El contraste entre los valores de literatura y los ajustados en este trabajo se presenta en la Tabla 4.5.

Tabla 4.5: Comparación de parámetros cinéticos: Literatura vs. Ajuste del Modelo.

Parámetro	Símbolo	Ref. (Petersen et al., 2026)	Este Trabajo (Ajustado)
Fracción sitios rápidos	η	0,65	0,50
Constante cinética (30°C)	$k_{amine} [\text{s}^{-1}]$	$9,5 \times 10^{-4}$	$6,14 \times 10^{-4}$

La bondad de ajuste se cuantificó mediante el cálculo de errores estadísticos entre los datos experimentales (y_{exp}) y la simulación (y_{sim}), obteniéndose un error global bajo ($RMSE = 0,058$)

que confirma la precisión del modelo. Aunque el RMSE del 5,8% supera levemente el umbral teórico ideal del 5%, se considera un ajuste satisfactorio dada la naturaleza dinámica no lineal del proceso y la incertidumbre inherente a la digitalización de los datos experimentales.

- Suma de Errores Al Cuadrado (SSE): 0,10
- Error Cuadrático Medio (MSE): 0,0034
- Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE): 0,058

La Figura 4.3 muestra el ajuste obtenido, donde se observa que el modelo describe correctamente tanto el tiempo de ruptura como la zona de saturación paulatina.

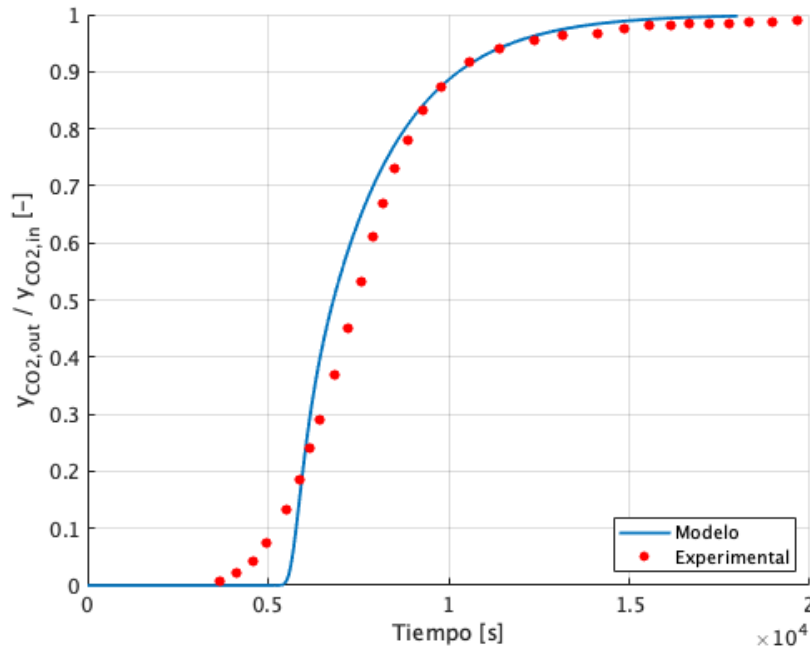


Figura 4.3: Comparación entre la curva de ruptura experimental y la simulada.

4.3.4 Validación de la curva de ruptura de desorción

Para completar la validación del modelo fenomenológico, se evaluó la capacidad del mismo para predecir la etapa de regeneración. Se simuló un proceso de desorción isotérmica a 30 °C utilizando N₂ puro como gas de purga, partiendo de un lecho inicialmente saturado a 400 ppm, replicando las condiciones experimentales reportadas por Petersen et al. (2026).

Un fenómeno crítico en sorbentes de amina es la asimetría cinética entre la adsorción y la desorción, donde esta última presenta una cinética significativamente más lenta, caracterizada por

una larga “cola” de desorción. Para capturar este comportamiento sin realizar un nuevo ajuste iterativo arbitrario, se aplicó un factor de escalamiento basado en la evidencia experimental de la literatura.

Petersen et al. (2026) reportan una disminución en la constante cinética de la fase amina (k_{amine}) de un orden de magnitud entre la adsorción y la desorción ($k_{amine,ads}^{ref} \approx 9,5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ vs $k_{amine,des}^{ref} \approx 1,0 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$), lo que implica una razón cinética de $R_k \approx 0,105$.

Asumiendo que esta proporcionalidad intrínseca del material se mantiene, se calculó el coeficiente de desorción para este trabajo aplicando dicha razón al parámetro de adsorción previamente ajustado:

$$k_{amine,des} = k_{amine,ads}^{ajustado} \times R_k = 6,14 \times 10^{-4} \times 0,105 \approx 6,5 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1} \quad (4.7)$$

Se mantuvo constante la fracción de sitios rápidos ($\eta = 0,50$). Es importante puntualizar un aspecto metodológico respecto al origen del factor de escala R_k . Dicha relación se obtuvo inicialmente a partir de los parámetros cinéticos de referencia de Petersen et al. (2026), cuyos valores absolutos para la etapa de adsorción debieron ser ajustados mediante un proceso iterativo en la Sección 4.3.3. Sin embargo, se asume que la proporción entre la velocidad de desorción y adsorción (R_k) sí se mantiene constante, ya que representa una propiedad física intrínseca del material (la lentitud con la que se liberan los carbamatos en la amina). Autores como Young et al. (2021) respaldan este enfoque al reportar diferencias de velocidad del mismo orden de magnitud para resinas similares (Lewatit VP OC 1065), por lo que se considera una aproximación válida para no perder la capacidad predictiva del modelo. La Figura 4.4 presenta la comparación entre los datos experimentales digitalizados y la simulación utilizando este parámetro derivado.

Para corroborar la similitud entre los valores simulados y los experimentales, se procedió a realizar un análisis estadístico, dando los siguientes resultados:

- Suma de Errores Al Cuadrado (SSE): 0,10
- Error Cuadrático Medio (MSE): 0,0038
- Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE): 0,061

Para sistemas dinámicos de desorción, el valor del RMSE (6,1 %) se considera menor y totalmente aceptable, ya que los fenómenos difusionales transitorios que ocurren en el lecho real son promediados con alta fidelidad por el modelo cinético implementado.

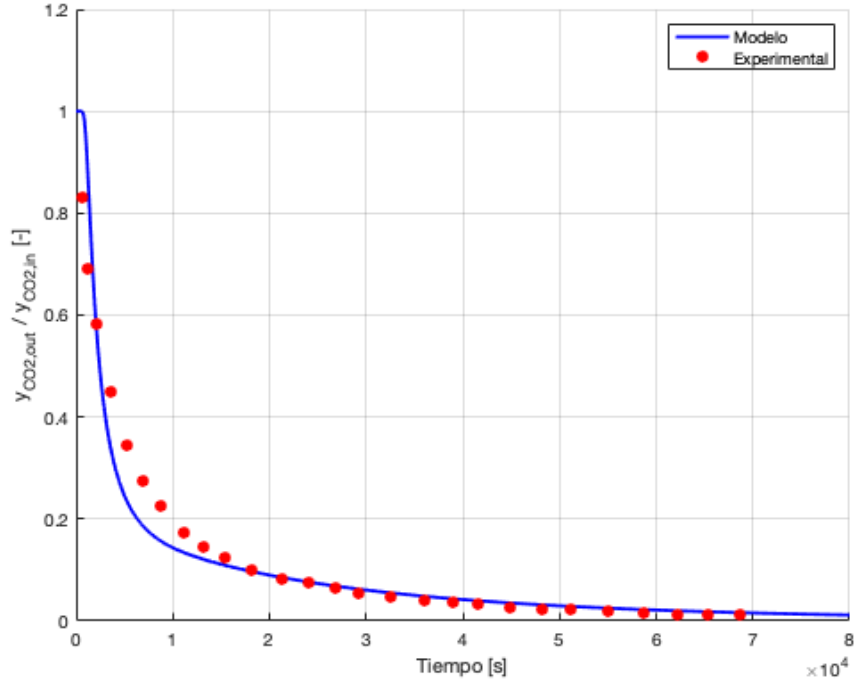


Figura 4.4: Validación de la curva de desorción isotérmica a 30 °C.

Como se observa en la Figura 4.4, el modelo *Dual-Site* con el parámetro escalado logra reproducir con alta fidelidad la dinámica de desorción, capturando correctamente la caída rápida inicial y, lo más importante, la “cola” lenta de desorción que se extiende por más de 80.000 segundos. Esto valida la robustez del modelo matemático para describir el ciclo completo de captura y regeneración.

4.4 Simulación de ciclo TVSA

Una vez validado el modelo fenomenológico y sus parámetros cinéticos, se extendió la simulación para describir un proceso cíclico de Adsorción por Cambio de Temperatura y Vacío (TVSA). La estrategia de operación se basa en la alternancia secuencial de etapas de carga y regeneración, siguiendo la lógica descrita por Schellevis et al. (2021) para contactores de lecho fijo, adaptada a las condiciones específicas de captura directa de aire.

Para alcanzar el Estado Estacionario Cíclico (CSS, *Cyclic Steady State*), se simularon consecutivamente 5 ciclos completos, utilizándose los perfiles de concentración y carga del último ciclo para el cálculo de los indicadores de desempeño. La elección de un horizonte de 5 ciclos consecutivos para las simulaciones dinámicas, está en base a criterios metodológicos estándar reportados en la literatura para sistemas de adsorción cíclica (TVSA). En configuraciones de lecho fijo a escala piloto y preindustrial, los efectos transitorios térmicos y de transferencia de masa asociados a las condiciones

iniciales del sorbente, se diluyen típicamente a partir del tercer ciclo de operación. Por lo tanto, establecer un marco de 5 ciclos asegura de manera robusta alcanzar el estado estacionario cíclico (CSS), asegurando que los balances de masa y energía extraídos en el último ciclo para el cálculo de los KPIs operativos sean estables, reproducibles y representativos de una operación continua. Esto se condice con los enfoques de modelación secuencial para columnas de adsorción desarrollados por el grupo de Mazzotti (Sabatino et al., 2021). El ciclo se compone de las siguientes etapas:

4.4.1 Definición de Etapas del Ciclo

1. **Etapas 1: Adsorción (Carga):** Se alimenta aire con 400 ppm de CO₂ a presión atmosférica (P_{atm}) y temperatura ambiente (T_{ads}). La etapa finaliza dinámicamente cuando la concentración de salida alcanza un porcentaje predefinido de la concentración de entrada (Criterio de Ruptura o *Ratio Break*), definido como:

$$\frac{y_{out}}{y_{in}} \geq R_{break} \quad (4.8)$$

Esto permite que el tiempo de adsorción (t_{ads}) se ajuste automáticamente según la capacidad del sorbente bajo distintas condiciones operativas.

2. **Etapas 2: Regeneración (Desorción TVSA):** Para regenerar el sorbente y recuperar el CO₂, se modifican simultáneamente las condiciones termodinámicas. Se simula un aumento de temperatura hasta T_{des} y una reducción de la presión total hasta P_{vac} . Se utiliza un flujo controlado de gas inerte (N₂) como gas de arrastre para facilitar la desorción. La duración de esta etapa (t_{des}) se fija para asegurar una regeneración suficiente del lecho (por ejemplo, 5000 s en el caso base).

4.4.2 Balance de Energía y Estimación de Consumos

Para evaluar la viabilidad energética del proceso, se cuantificaron los requerimientos térmicos y mecánicos asociados a cada ciclo. Las ecuaciones energéticas y sus definiciones, detalladas a continuación, fueron obtenidas según lo reportado por Luukkonen et al. (2023)

- **Energía Térmica (Q_{th}):** El calor total suministrado al sistema se calculó considerando la suma del calor sensible para calentar el lecho y el calor latente de desorción:

$$Q_{th} = Q_{sens} + Q_{des} \quad (4.9)$$

Donde el calor sensible incluye la energía necesaria para calentar el material adsorbente (m_{ads}), el gas contenido en los espacios vacíos y la estructura del lecho desde T_{ads} hasta T_{des} .

El calor latente se calcula en función de los moles de CO₂ desorbidos (n_{des}) y la entalpía de adsorción (ΔH_{ads}):

$$Q_{des} = n_{des} \cdot \Delta H_{ads} \quad (4.10)$$

- **Energía Mecánica (W_{mec}):** El trabajo mecánico considera dos contribuciones principales:

1. **Trabajo de Impulsión (Ventiladores):** Necesario para vencer la caída de presión (ΔP) a través del lecho durante la etapa de adsorción, calculada mediante la ecuación de Ergun.

$$W_{fan} = \frac{\Delta P \cdot V_{gas,ads}}{\eta_{fan}} \quad (4.11)$$

2. **Trabajo de Vacío:** Energía requerida por la bomba de vacío para extraer el gas durante la regeneración desde P_{vac} hasta la presión atmosférica P_{atm} . Se modela asumiendo una compresión isotérmica ¹ con una eficiencia η_{vac} :

$$W_{vac} = \frac{n_{gas,des} \cdot RT_{des}}{\eta_{vac}} \ln \left(\frac{P_{atm}}{P_{vac}} \right) \quad (4.12)$$

4.4.3 Indicadores Clave de Desempeño (KPIs)

Para evaluar la eficiencia técnico-económica del proceso y comparar las distintas configuraciones operativas, se definieron cuatro indicadores claves de desempeño (KPIs). Las ecuaciones fueron adaptadas de la metodología propuesta por Ghiri et al. (2025).

1. **Pureza del CO₂ (Y_{CO_2}):** Fracción molar promedio de CO₂ en la corriente de producto acumulada durante la desorción.

$$Y_{CO_2} = \frac{n_{CO_2,prod}}{n_{total,prod}} \quad (4.13)$$

2. **Recuperación (R):** Porcentaje de CO₂ capturado respecto al total de CO₂ que ingresó al sistema durante la etapa de adsorción.

$$R = \frac{n_{CO_2,prod}}{n_{CO_2,in}} \times 100 \quad (4.14)$$

¹El modelo base utiliza la expresión isotérmica para obtener el límite inferior del trabajo de compresión útil. En una operación industrial real, el proceso se acerca más a una compresión politrópica con un exponente característico de entre 1,2 y 1,4; lo que podría elevar el consumo de vacío entre un 15% y un 20%. Por lo tanto, los valores calculados para los Escenarios B y C deben interpretarse como un caso de eficiencia máxima optimista con respecto al OPEX energético.

3. **Productividad (Pr):** Masa de CO_2 capturado por unidad de masa de adsorbente y por unidad de tiempo (considerando el tiempo total del ciclo $t_{ciclo} = t_{ads} + t_{des}$).

$$Pr = \frac{m_{CO_2,prod}}{m_{sorbente} \cdot t_{ciclo}} \quad \left[\frac{\text{kg}_{CO_2}}{\text{kg}_{ads} \cdot \text{día}} \right] \quad (4.15)$$

4. **Consumo Específico de Energía (SEC):** Energía total requerida por tonelada de CO_2 capturado.

$$SEC = \frac{Q_{th} + W_{mec}}{m_{CO_2,prod}} \quad \left[\frac{\text{MJ}}{\text{kg}_{CO_2}} \text{ o } \frac{\text{kWh}}{\text{t}_{CO_2}} \right] \quad (4.16)$$

4.4.4 Diseño del Análisis de Sensibilidad

Para determinar las condiciones de operación que maximizan la productividad y minimizan el costo energético, se realizó un barrido paramétrico sobre cuatro variables críticas del proceso TVSA. El análisis parte del Caso Base definido en la validación y explora los rangos presentados en la Tabla 4.6.

Tabla 4.6: Variables de operación y rangos evaluados en el análisis de sensibilidad.

Variable	Símbolo	Caso Base	Rango Evaluado
Presión de Vacío	P_{vac}	0,30 bar	0,1 – 0,90 bar
Temperatura de Desorción	T_{des}	100 °C	60 – 120 °C
Temperatura de Adsorción	T_{ads}	30 °C	10 – 30 °C
Criterio de Ruptura	$Ratio_{break}$	10%	10% – 95%

El análisis se realizó modificando una variable a la vez , manteniendo las demás en sus condiciones base, para aislar el efecto de cada parámetro sobre los KPIs definidos. Cabe señalar que el rango de la temperatura de adsorción (*i.e* temperatura ambiental) fue evaluado según datos metereológicos reales de la zona de Mejillones, con datos obtenidos de Sistema de Información Nacional de Calidad del Aire (2025).

Es importante destacar que el análisis paramétrico se realizó bajo el supuesto de una variable a la vez (OAT), lo cual implica una limitación metodológica ya que no permite capturar las interacciones cruzadas ni el acoplamiento termodinámico intrínseco entre variables críticas (por ejemplo, la interdependencia entre la temperatura de desorción T_{des} y la presión de vacío P_{vac}). Un análisis factorial completo o una metodología de superficie de respuesta (RSM) se perfilan como extensiones necesarias para trabajos futuros, para permitir mapear el espacio de diseño multidimensional y poder identificar el óptimo global de la planta con mayor precisión estadística.

4.5 Selección de escenarios y escalamiento

Con el objetivo de evaluar la viabilidad técnico-económica de la tecnología en distintas condiciones de operación y escalas de producción, se definió una metodología de evaluación basada en escenarios discretos y una estrategia de escalamiento modular.

4.5.1 Estrategia de Definición de Escenarios

Para capturar la variabilidad del desempeño del sistema y su impacto en los costos finales, se estableció una estrategia de tres escenarios operativos contrastantes (A, B y C). La selección de los parámetros específicos de presión (P_{vac}) y temperatura (T_{ads}, T_{des}) para cada escenario se realizó posterior al análisis de sensibilidad paramétrico, buscando cubrir el espacio de diseño de la siguiente manera:

1. **Escenario A (Enfoque en Eficiencia Energética):** Configuración orientada a minimizar el Consumo Específico de Energía (SEC). Se seleccionan condiciones de vacío moderado y temperaturas que reduzcan la carga térmica y eléctrica, aceptando una posible reducción en la pureza del producto.
2. **Escenario B (Caso Base Optimizado):** Representa el punto de operación de compromiso o *trade-off* óptimo identificado en el análisis de sensibilidad. Equilibra la productividad, la recuperación y el costo energético.
3. **Escenario C (Enfoque en Alta Pureza/Productividad):** Configuración agresiva diseñada para maximizar la fuerza impulsora del proceso (mayor vacío y temperatura de regeneración), priorizando la calidad del gas producto por sobre el ahorro energético.

Cabe destacar que, para efectos de comparabilidad, el criterio de ruptura (C_{out}/C_{in}) se mantiene constante en los tres escenarios, fijándose en el valor que maximiza la eficiencia global según los resultados de la simulación dinámica.

4.5.2 Definición del Módulo Industrial de Referencia

Para el escalamiento, se definió una unidad base o módulo industrial inspirado en la geometría de los colectores de plantas comerciales existentes. Se tomó como referencia el módulo propuesto por Kim and Léonard (2022), quienes en su trabajo detallan que las dimensiones del módulo industrial DAC fueron seleccionadas arbitrariamente desde los rangos de diseño paralelepípedicos informados en las patentes de Climeworks (Gebald et al., 2014, 2015) y la fracción de vacío se obtuvo del trabajo de Sabatino et al. (2021).

Las dimensiones y características del módulo base utilizado a escala industrial se detallan en la Tabla 4.7.

Tabla 4.7: Características geométricas y físicas del módulo industrial base. Adaptado de Kim and Léonard (2022).

Parámetro	Símbolo	Valor / Descripción
Configuración Geométrica	-	Paralelepípedo rectangular
Dimensiones ($L \times H \times W$)	-	2,0 m $\times$ 2,0 m $\times$ 0,5 m
Volumen del Lecho	V_{bed}	2,0 m ³
Porosidad del Lecho	ε_b	0,60
Densidad de cálculo	ρ_{ref}	680 kg/m ³
Masa de Sorbente	m_{sorb}^{mod}	≈ 544 kg

La masa de sorbente por módulo (m_{sorb}^{mod}) se determinó mediante la relación volumétrica considerando el fracción sólida del lecho:

$$m_{sorb}^{mod} = \rho_{ref} \cdot (1 - \varepsilon_b) \cdot V_{bed} \quad (4.17)$$

4.5.3 Metodología de Escalamiento

Para el escalamiento del proceso, se definieron tres capacidades objetivo de planta (F_{target}):

1. **Planta Piloto:** 100 ton CO₂/año.
2. **Planta Comercial Pequeña:** 10.000 ton CO₂/año.
3. **Planta Gran Escala:** 1.000.000 ton CO₂/año.

La elección de estas capacidades de planta se fundamenta en la evolución histórica y la hoja de ruta tecnológica de la industria S-DAC, tomando como referencia los logros de desarrollo de la empresa Climeworks. La capacidad de 100 ton CO₂/año es representativa de la escala piloto o demostrativa, comparable a los primeros módulos individuales de la planta *Capricorn* (Hinwil, Suiza $\approx$ 900 ton/año). La capacidad de 10.000 ton CO₂/año corresponde a una planta comercial pequeña, situándose en el orden de magnitud de las instalaciones en Islandia, como *Orca* (4.000 ton CO₂/año) y la reciente *Mammoth* (36.000 ton CO₂/año). Finalmente, la escala de 1.000.000 ton CO₂/año representa el objetivo de “Megaton Hub”, considerando el estándar necesario para que esta tecnología tenga relevancia climática hacia el año 2030, alineándose con proyectos como *Stratos* o algunos Hubs de DAC en Estados Unidos (Climeworks, 2025).

El número de módulos requeridos (N_{mod}) para cada capacidad se determinó a partir de la productividad intensiva (Pr) obtenida en la simulación TVSA de un solo módulo y un Factor

de Capacidad (CF) de planta de 0,90 (operación el 90% del año), según la siguiente relación implementada en el código:

$$N_{mod} = \frac{F_{target} \cdot 1000}{365 \cdot CF \cdot (Pr \cdot m_{sorb}^{mod})} \quad (4.18)$$

Donde:

- F_{target} : Capacidad objetivo [ton CO₂/año].
- Pr : Productividad simulada del escenario [kg CO₂ / (kg sorbente · día)].
- m_{sorb}^{mod} : Masa de sorbente por módulo [kg].

Finalmente, los consumos energéticos totales de la planta (MW térmicos y eléctricos) se calcularon multiplicando los consumos específicos por ciclo (MJ/kg CO₂) por la tasa de producción másica total de la planta.

Se asumió una estrategia de escalamiento según el tipo de equipo. Para el núcleo central de la captura, se considero un escalamiento modular lineal (1:1): los contactores, masa de sorbente y ventiladores aumentan proporcionalmente a la capacidad, siendo constante el tamaño y rendimiento de cada unidad individual. Por el contrario, los sistemas auxiliares escalan por trenes de proceso. Las bombas de vacío se agrupan en trenes para manejar el caudal total. Asimismo, la caldera se dimensionó en función del requerimiento energético total.

4.5.4 Supuestos del escalamiento laboratorio a industrial

La extrapolación de los resultados de la simulación 1D al diseño de la planta industrial se rige bajo los siguientes supuestos:

- Se asume que la relación flujo de aire/masa de sorbente en el módulo industrial se mantiene constante respecto al caso base simulado. Por tanto, los indicadores de productividad y SEC por kg de sorbente se consideran transferibles linealmente.
- No se modelan explícitamente los gradientes de temperatura ni las pérdidas térmicas hacia el ambiente a través de las paredes del módulo industrial. Se considera que el aislamiento es perfecto y el comportamiento es adiabático.
- Se desprecia el efecto de canales preferentes o mala distribución del flujo que podría ocurrir al pasar de una columna delgada a un lecho rectangular de gran sección transversal.
- El análisis energético se centra exclusivamente en los equipos directos del ciclo TVSA (calor sensible/latente, ventiladores y bombas de vacío). No se incluyen consumos auxiliares por

transporte de fluidos fuera del módulo (piping), sistemas de control, iluminación o tratamiento posterior del CO₂.

4.6 Metodología económica

Para determinar la viabilidad comercial de los distintos escenarios operativos y escalas de producción, se desarrolló un modelo de costos basado en la metodología estándar de estimación para plantas químicas propuesta por Peters et al. (2003). El objetivo es obtener CAPEX, OPEX y LCOD para diferentes casos y sensibilidades.

Una limitación metodológica expresa es que los factores clásicos de estimación de capital Peters et al. (2003) se desarrollaron para la industria química convencional de procesos continuos y por tanto podrían no reflejar con total exactitud la naturaleza modular de una planta S-DAC. En tecnologías emergentes con manufactura en serie (similares a sistemas HVAC industriales), los costos asociados a instalación, piping y supervisión en terreno tienden a ser menores que en el esquema convencional. Esta discrepancia introduce una incertidumbre intrínseca al análisis de clase preliminar, la cual se trata de mitigar mediante los rangos de sensibilidad (Bajo, Medio y Alto) definidos para el CAPEX. Esta sensibilidad a los costos se explicará con mayor detalle a continuación.

4.6.1 Estructura de Casos y Análisis de Incertidumbre

Dada la incertidumbre intrínseca asociada a la estimación de costos en tecnologías emergentes como la captura directa de aire, este análisis evita restringirse a un valor económico único o determinista. En su lugar, se estableció una matriz de evaluación integral que integra las variables técnicas con sensibilidades económicas para robustecer los resultados.

La metodología se fundamenta en el análisis de 27 casos de estudio totales. Estos surgen, en primera instancia, de los nueve casos base técnicos derivados de la combinación de los tres escenarios operativos propuestos (A, B y C) con las tres escalas de producción evaluadas (100, 10.000 y 1.000.000 toneladas de CO₂ por año). Posteriormente, para cada una de estas configuraciones técnicas, se aplicaron tres niveles de incertidumbre económica —clasificados como optimista (precio bajo), base (precio medio) y pesimista (precio alto)—, los cuales introducen variabilidad en los precios unitarios de los equipos principales: el contactor y el sorbente.

4.6.2 Estimación de Costos de Capital (CAPEX)

La Inversión de Capital Fijo se estimó utilizando el método detallado por Peters et al. (2003). Primero, se calculó el costo de equipamiento directo para los componentes principales:

1. **Módulos de Contacto:** Estructura donde se inserta el sorbente.
2. **Sorbente (Carga Inicial):** Volumen inicial requerido para llenar los módulos.
3. **Sistemas de Vacío:** Bombas de vacío asociadas.
4. **Sistemas de Ventilación:** Ventiladores axiales para la impulsión del aire.
5. **Generación Térmica:** Caldera o sistema de calentamiento para la regeneración.

Para el escalamiento de costos de equipos entre distintas capacidades, se utilizó la regla de los seis décimos o método de Williams descrita en la Ec. 4.19, asumiendo un exponente de escala $n \approx 0.6$ en ausencia de datos específicos del proveedor (Peters et al., 2003):

$$C_2 = C_1 \left(\frac{Q_2}{Q_1} \right)^n \quad (4.19)$$

Donde C_2 es el costo del equipo de capacidad desconocida (2), C_1 es el costo del equipo de capacidad conocida (1), Q_2 es la capacidad del equipo 2, Q_1 es la capacidad del equipo 1 y n es el exponente de escala.

La estructura de la inversión se define dividiendo el Costo Total de Inversión en dos grandes categorías. La primera corresponde al Capital Fijo, el cual agrupa el costo de adquisición de los equipos, junto con todos los costos directos e indirectos asociados a la construcción y puesta en marcha; este ítem representa el 85% del costo total. El 15% restante se asigna al Capital Circulante o de Trabajo, necesario para cubrir los gastos operativos iniciales antes de que la planta genere ingresos. Para estimar el Capital Fijo, se aplicó el método de factores de Peters y Timmerhaus, utilizando los porcentajes detallados en la Tabla 4.8 aplicados sobre el costo base de los equipos.

Tabla 4.8: Desglose de factores económicos para la estimación de costos de inversión (Peters et al., 2003).

Componente de Costo	Factor (% del costo de equipos)
Costos Directos	
Instalación de equipos	39
Instrumentación y control (instalados)	13
Tuberías (instaladas)	31
Instalaciones eléctricas (instaladas)	10
Edificios (incluyendo servicios)	29
Mejoras en el terreno	10
Servicios auxiliares (instalados)	55
Terrenos	6
Costos Indirectos	
Ingeniería y supervisión	32
Gastos de construcción	34
Otros Costos	
Tasa del contratista	5*
Contingencia	10*

* Porcentaje aplicado sobre la suma de costos directos e indirectos.

Cabe destacar una consideración metodológica fundamental en la aplicación de los factores de instalación. Con la metodología clásica, los inventarios químicos (ejemplo, sorbente) no suelen estar sujetos a los mismos multiplicadores de obra civil y tuberías que los equipos de proceso (reactores o calderas). Sin embargo, debido a que se trata de una estimación preliminar (Clase 4/5) para una tecnología modular emergente y sin precedentes a escala comercial en el norte de Chile, se tomó la decisión ingenieril de aplicar los factores globales de Peters y Timmerhaus sobre el costo directo total, incluyendo la carga inicial de sorbente. Esta aproximación asume el rol de una contingencia extrema frente a la altísima incertidumbre logística, de importación y de montaje en zonas desérticas. Los valores de CAPEX y LCOD obtenidos en este trabajo deben, por lo tanto, interpretarse como una cota superior o caso conservador. En etapas de ingeniería de detalle, independizar el sorbente de los factores de instalación estructural, reduciría significativamente el Capital Fijo, mejorando la competitividad económica de la planta.

4.6.3 Estimación de Costos Operativos (OPEX)

La estimación de los costos operativos anuales integra los requerimientos energéticos directos del proceso (electricidad y calor), la reposición periódica del material adsorbente y los costos asociados a la administración, operación y mantenimiento de la planta. El Costo Operativo Total se calculó como la suma aritmética de todos estos componentes, considerando un funcionamiento en régimen continuo de 7.884 horas efectivas al año, lo que corresponde a un factor de capacidad del 90%.

El costo asociado al consumo eléctrico se determinó diferenciando la potencia requerida por los sistemas de impulsión de aire (ventiladores) y los sistemas de vacío. Para los ventiladores, el costo anual (C_{fan}) se calculó multiplicando la potencia total instalada (P_{fan}) por las horas de operación anual (t_{op}) y el precio de la electricidad:

$$C_{fan} = P_{fan} \cdot t_{op} \cdot \text{Precio}_{elec} \quad (4.20)$$

De manera análoga, el costo operativo de las bombas de vacío (C_{vac}) se determinó en función de la potencia total de vacío de la planta (P_{vac}):

$$C_{vac} = P_{vac} \cdot t_{op} \cdot \text{Precio}_{elec} \quad (4.21)$$

Para el suministro de energía térmica necesaria en la etapa de desorción, se consideró el uso de una caldera alimentada por gas natural. El costo anual (C_{term}) considera la potencia térmica requerida (P_{term}), el precio del combustible y la eficiencia de conversión de la caldera ($\eta_{caldera}$), según la relación:

$$C_{term} = \frac{P_{term} \cdot t_{op} \cdot \text{Precio}_{GN}}{\eta_{caldera}} \quad (4.22)$$

Un componente crítico en la estructura de costos de la captura directa de aire es la reposición del material adsorbente debido a su degradación natural o mecánica. Este costo anual (C_{sorb}) se estimó considerando la masa total de inventario en la planta (M_{sorb}), el precio unitario del material y su vida útil esperada:

$$C_{sorb} = \frac{M_{sorb} \cdot \text{Precio}_{sorbente}}{\text{Vida Útil}} \quad (4.23)$$

Los parámetros económicos base utilizados para estos cálculos, incluyendo precios de energéticos y vida útil del sorbente, se detallan en la Tabla 4.9. Se evaluaron tres escenarios de precio para el sorbente (bajo, medio y alto) para capturar la incertidumbre del mercado de materiales. El valor de 70 USD/MWh para el precio de la electricidad es consistente con los reportes de precios de contrato para clientes libres en la zona norte emitidos por la Comisión Nacional de Energía. Según antecedentes históricos del Coordinador Eléctrico Nacional, los precios promedio costo marginal en las barras de la zona de Antofagasta (SING) han oscilado históricamente en un rango de entre 55 y 85 USD/MWh, debido a la alta penetración de generación solar fotovoltaica. Por tanto, el valor adoptado se sitúa como un promedio ponderado representativo y conservador para la operación continua de la planta.

Tabla 4.9: Parámetros y supuestos económicos para el cálculo del OPEX.

Parámetro	Valor	Unidad	Ref.
Precio Electricidad	70	USD/MWh	Medinilla (2025)
Precio Gas Natural	25	USD/MWh _{th}	Comisión Nacional de Energía (2025)
Eficiencia Caldera ($\eta_{caldera}$)	0,9	-	—
Horas efectivas anuales (t_{op})	7.884	h/año	—
Vida útil sorbente	4	Años	Young et al. (2023)
Precio Sorbente (B/M/A)	8 / 25 / 40	USD/kg	Young et al. (2023); Nilsson (2024); Aljishi et al. (2025)

Finalmente, se incorporaron los costos indirectos de operación y manufactura utilizando factores de estimación estándar basados en la metodología de Peters y Timmerhaus. Estos incluyen mantenimiento, mano de obra, supervisión, administración, seguros e impuestos. Los factores aplicados se presentan en la Tabla 4.10, calculados ya sea como porcentaje de la Inversión de Capital Fijo, de la Mano de Obra o del Costo Total de Producción.

Tabla 4.10: Factores de estimación para costos operativos indirectos y de manufactura (Peters et al., 2003).

Ítem de Costo	Base de Cálculo
Mano de Obra	6% del Costo Total de Producción
Mantenimiento y Reparaciones	6% del Capital Fijo
Suministros Operativos	10% del Mantenimiento
Supervisión Directa	10% de la Mano de Obra
Control de Calidad	15% de la Mano de Obra
Administración	15% de la Mano de Obra
Tarifas Locales	1% del Capital Fijo
Seguros	0,3% del Capital Fijo

4.6.4 Cálculo del Costo Nivelado (LCOD)

El indicador final de desempeño económico se calcula anualizando la inversión inicial sobre la vida útil de la planta y sumando los costos operativos, normalizado por la producción anual de CO₂:

$$LCOD = \frac{(CAPEX \cdot CRF) + OPEX_{anual}}{\text{Producción Anual de CO}_2} \left[\frac{\text{USD}}{\text{tCO}_2} \right] \quad (4.24)$$

Donde CRF es el Factor de Recuperación de Capital, dependiente de la tasa de descuento (i) y la vida útil de la planta (n):

$$CRF = \frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \quad (4.25)$$

Se toma como supuesto un valor de n igual a 20 años y un valor i de 10%.

Capítulo 5

Resultados

5.1 Caso Base

El desempeño del ciclo TVSA fue evaluado una vez alcanzado el Estado Estacionario Cíclico (CSS). La estrategia de operación para el Caso Base se definió priorizando la recuperación de CO_2 , estableciendo un corte temprano en la etapa de adsorción. A continuación, se analiza la dinámica de los perfiles de concentración y carga en el lecho.

5.1.1 Dinámica de la Adsorción

La Figura 5.1 muestra la curva de ruptura del último ciclo simulado. Se observa el comportamiento característico (que coincide con el de la Figura 4.3 para la validación del modelo), donde la concentración de salida aumenta a medida que el lecho se satura.

Para este Caso Base, se definió detener la etapa de carga cuando la concentración de salida alcanza el 10% de la concentración de entrada ($C_{out}/C_{in} = 0,10$), lo cual ocurre aproximadamente a los 2800 segundos. Esta decisión operativa, indicada por la línea roja discontinua, permite trabajar exclusivamente en la zona de alta transferencia de masa, evitando los tiempos prolongados asociados a la saturación final del lecho y maximizando así la recuperación instantánea.

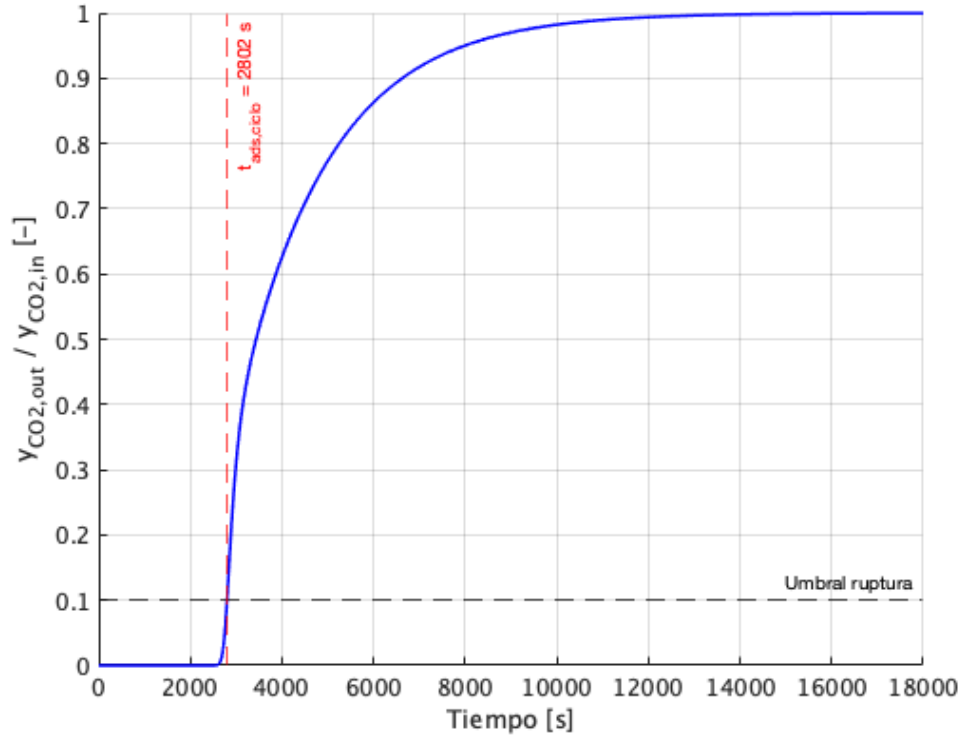


Figura 5.1: Curva de ruptura durante la etapa de adsorción. La línea roja indica el tiempo de corte (t_{ads}) seleccionado para evitar la saturación completa y maximizar la eficiencia de captura.

5.1.2 Dinámica de la Regeneración

En la etapa de desorción, la aplicación simultánea de vacío ($P = 0,3 \text{ bar}$) y temperatura ($T = 100 \text{ }^{\circ}\text{C}$) genera un cambio abrupto en el equilibrio termodinámico. La Figura 5.2 presenta el perfil de pureza del gas de salida en escala logarítmica.

Se evidencia un comportamiento de “desorción flash” al inicio del proceso ($t \approx 0$), donde la pureza del CO_2 se dispara instantáneamente a valores superiores, para luego decaer rápidamente debido a la dilución con el gas de purga (N_2). El uso de la escala logarítmica permite apreciar que, aunque la pureza cae, existe una ventana operativa inicial donde la concentración se mantiene órdenes de magnitud por encima de la línea base, lo cual es crítico para la recolección del producto.

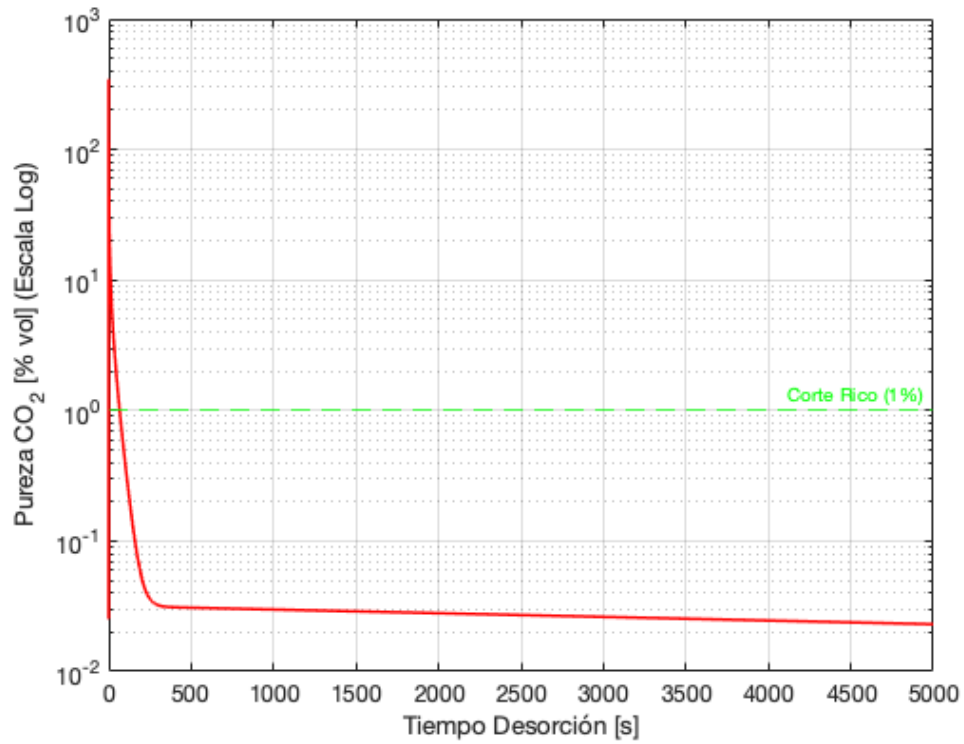


Figura 5.2: Perfil de pureza de salida durante la regeneración.

Complementariamente, la Figura 5.3 ilustra la regeneración desde la perspectiva del material sólido. La carga promedio del lecho (q_{avg}) disminuye progresivamente desde su estado de carga hasta un valor remanente estable ($\approx 0,3$ del valor inicial). Esto confirma que el tiempo de regeneración asignado (5000 s) es efectivo para restaurar la capacidad de trabajo del sorbente, dejándolo acondicionado para iniciar el siguiente ciclo de adsorción.

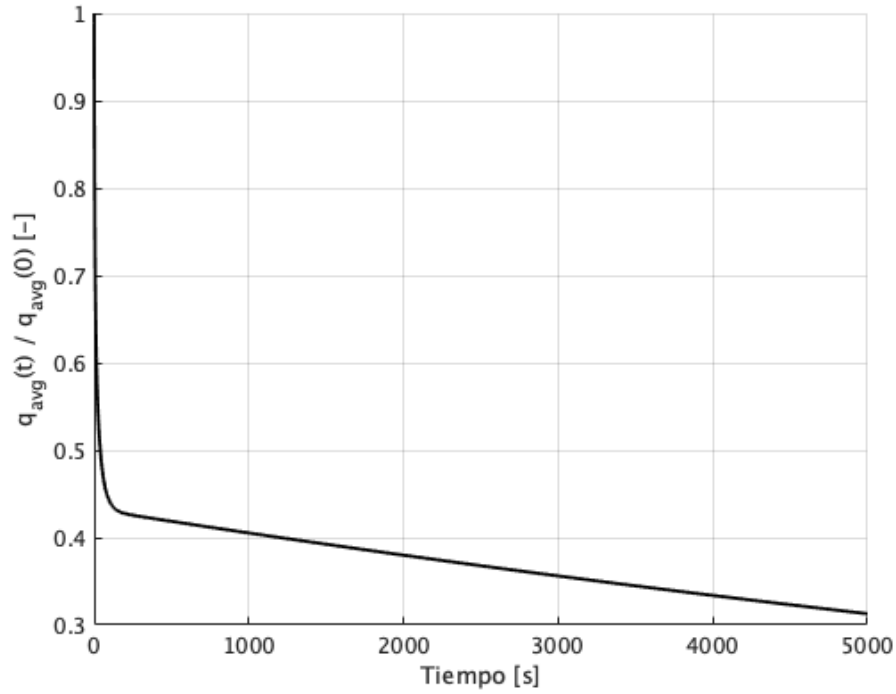


Figura 5.3: Perfil de regeneración del material adsorbente.

5.1.3 Resumen de Indicadores de Desempeño (KPIs)

La Tabla 5.1 resume los parámetros operacionales y los indicadores de eficiencia técnica obtenidos. Se presentan los resultados para la recolección global (todo el gas effluente) y para un escenario de “Corte Rico”, donde se recolecta selectivamente el gas con pureza superior al 1%.

Tabla 5.1: Resumen de KPIs para el Caso Base.

Parámetro	Valor Global	Corte Rico (> 1%)
Parámetros Operacionales		
Tiempo Adsorción (t_{ads})	2807 s	
Tiempo Desorción (t_{des})	5000 s	
Tiempo de Ciclo Total	7807 s (2,17 h)	
Ciclos por día	11 ciclos/día	
Productividad	0,204 kg CO ₂ /(kg _{ads} · día)	
Indicadores de Eficiencia		
Recuperación de CO ₂	84,77 %	66,55 %
Pureza Promedio	0,16 %	9,32 %

Los resultados indican que, si bien la recuperación global es alta ($> 84\%$), la pureza promedio es insuficiente para aplicaciones directas. Sin embargo, al aplicar la estrategia de Corte Rico, se logra elevar la pureza a un $9,32\%$ manteniendo una recuperación competitiva del $66,55\%$. Esto valida la capacidad del sistema TVSA en Mejillones para actuar como una etapa efectiva de pre-concentración de CO_2 .

Es importante resaltar que los valores de pureza obtenidos en el presente modelo están condicionados por el empleo de N_2 como gas de arrastre durante la etapa de desorción, en concordancia con el protocolo experimental de Petersen et al. (2026) adoptado para la validación. En los sistemas industriales S-DAC como los de la empresa Climeworks, la desorción no se hace con gas de arrastre, sino con vacío puro y precedida por una etapa inicial de purga (*blowdown*) para evacuar cualquier gas intersticial remanente en el contactor antes de comenzar la regeneración del sorbente. Este procedimiento, que no forma parte del protocolo de referencia, permite obtener corrientes de CO_2 con purezas superiores al 80% sin etapas adicionales de purificación. Al incorporar N_2 , se produce una dilución intrínseca del producto que disminuye los valores de pureza medidos, sin importar cuáles sean las condiciones operativas. Por tanto, los valores de pureza obtenidos en el presente trabajo deben interpretarse como un límite inferior del comportamiento que puede esperarse en un sistema industrial con desorción por vacío puro.

5.2 Análisis de Sensibilidad

Se estudió el efecto de las principales variables operacionales sobre los KPIs. Los resultados se presentan a continuación.

5.2.1 Efecto de la Presión de Vacío

La presión de vacío es la variable de diseño más crítica en sistemas TVSA, ya que gobierna tanto el equilibrio termodinámico de desorción como el consumo de potencia de las bombas de vacío. La Figura 5.4 y Figura 5.5 resumen los compromisos observados.

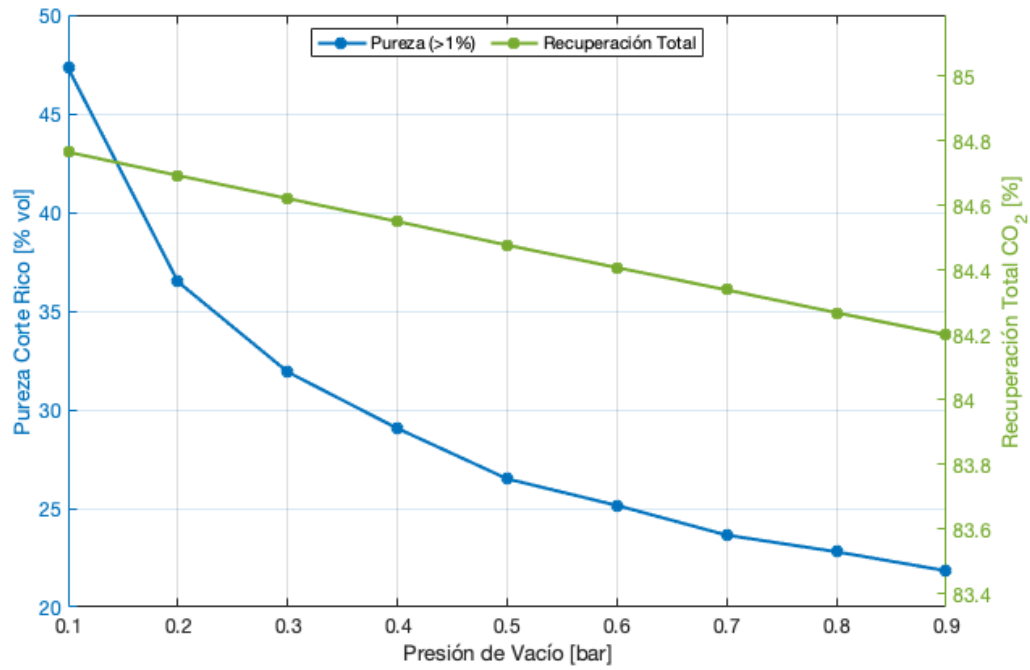


Figura 5.4: Sensibilidad a la presión de vacío. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación total.

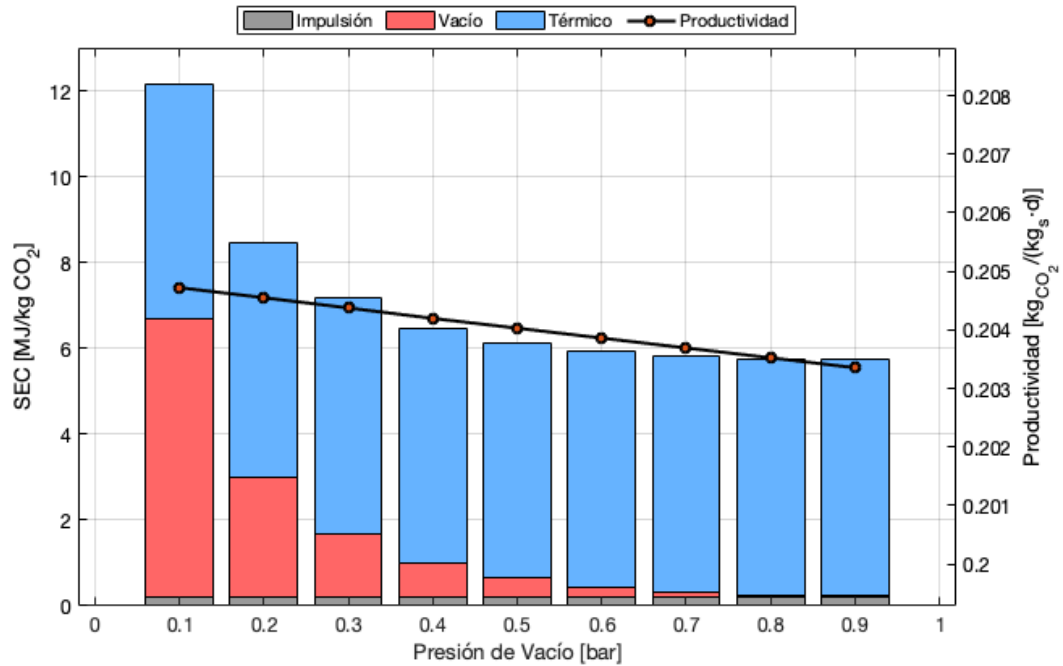


Figura 5.5: Sensibilidad a la presión de vacío. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.

Como se observa en la Figura 5.5, el Consumo Específico de Energía (SEC) presenta una fuerte dependencia exponencial con el nivel de vacío. Al operar a presiones muy bajas (0,1 bar), el consumo energético se dispara a 12 MJ/kg debido al elevado trabajo de ejercido por la bomba de vacío, que representa el mayor componente del costo energético. A medida que la presión aumenta hacia 0,9 bar, el SEC disminuye hasta estabilizarse cerca de los 6 MJ/kg. Es destacable que la productividad del sistema es prácticamente insensible a esta variable, variando menos de un 1% en todo el rango.

Por otro lado, la Figura 5.4 muestra el impacto en la calidad del producto. Operar a vacíos profundos (0,1 bar) favorece significativamente la pureza del producto (alcanzando $> 50\%$ en el corte rico), ya que la baja presión facilita la desorción rápida y minimiza la dilución. La recuperación total muestra una leve tendencia a la baja, pero se mantiene robusta por sobre el 84% en todos los casos.

En resumen, se observa que la recuperación (Figura 5.4) y la productividad (Figura 5.5) son prácticamente insensibles a la presión de vacío en el rango estudiado. La elección del vacío óptimo depende exclusivamente de la pureza y energía. Considerando el alto costo energético de operar a 0,1 bar, se sugiere un punto de operación intermedio entre 0,3 y 0,4 bar. En este rango, se mantiene un SEC razonable (6,0 – 7,0 MJ/kg) sin sacrificar excesivamente la pureza, logrando un balance tecno-económico óptimo.

5.2.2 Efecto de la Temperatura de Adsorción

Esta variable simula el impacto de las condiciones ambientales estacionales en la zona de Mejillones. La Figura 5.6 y Figura 5.7 presentan los resultados obtenidos para un rango entre 10 y 30 °C.

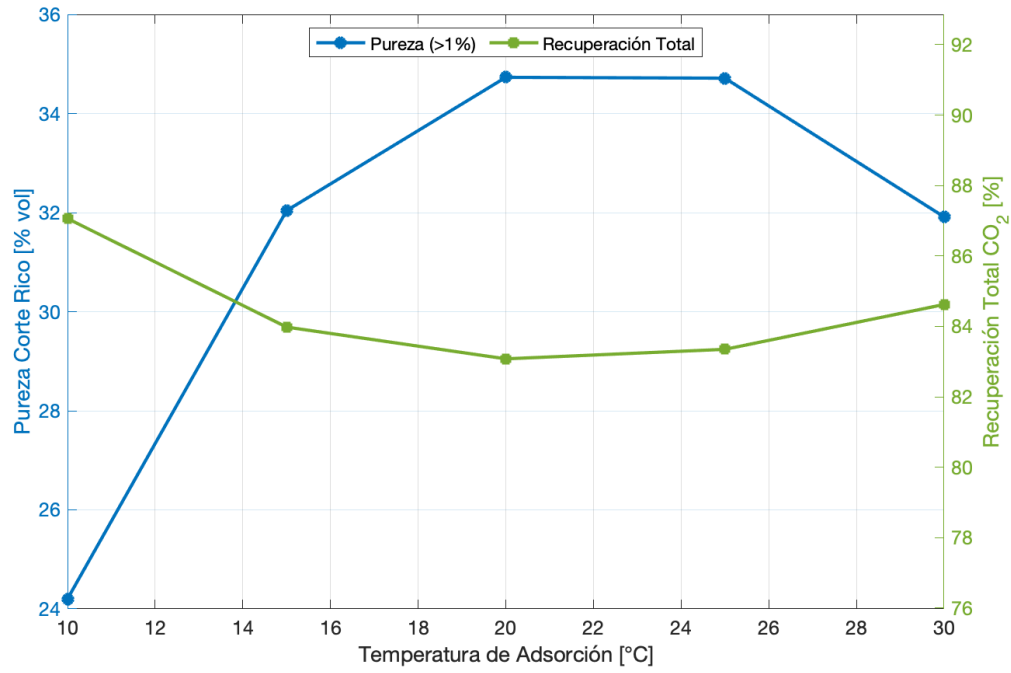


Figura 5.6: Sensibilidad a la temperatura de adsorción. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación total.

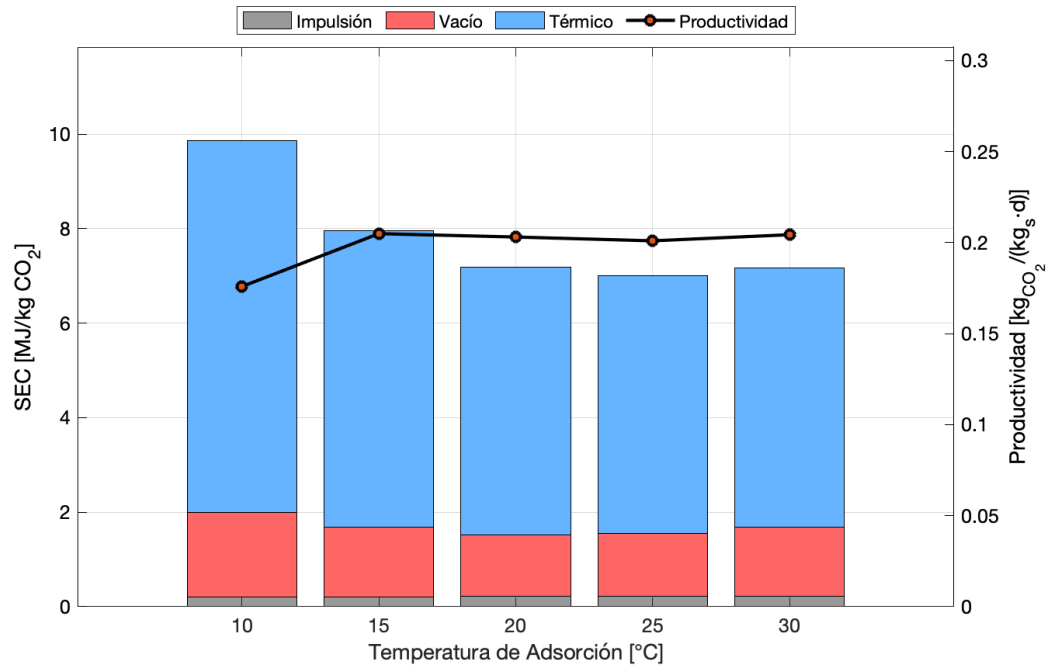


Figura 5.7: Sensibilidad a la temperatura de adsorción. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.

El análisis energético (Figura 5.7) revela un comportamiento crítico y no lineal. Operar a temperaturas ambiente bajas (10 °C) resulta en una penalización severa del SEC, alcanzando valores cercanos a 9,9 MJ/kg. Esto se explica al observar el desglose de las barras apiladas: el componente térmico (barra azul) aumenta significativamente. Al fijar la temperatura de regeneración en 100 °C, una alimentación a 10 °C implica un salto térmico (ΔT) de 90 °C. Este incremento en la demanda de calor sensible para calentar la masa inerte del lecho supera el beneficio termodinámico de una mayor capacidad de adsorción a baja temperatura.

Por el contrario, a temperaturas elevadas (30 °C), aunque el salto térmico es menor, la capacidad de carga del material disminuye debido a la naturaleza exotérmica de la adsorción. Esto reduce la masa neta de CO₂ capturada por ciclo, penalizando levemente el SEC (7,2 MJ/kg), ya que se invierte energía en calentar el soporte sólido para recuperar una menor cantidad de producto.

Adicionalmente, se identifica un compromiso cinético importante. A 10 °C, la pureza del producto cae drásticamente al 24% (Figura 5.6), atribuible a limitaciones cinéticas que dispersan el frente de desorción. Sin embargo, en el rango de 20 – 25 °C, se observa una ventana operativa ideal donde se maximiza la productividad ($> 0,20 \text{ kgCO}_2/\text{kg}_{\text{sorb}}/\text{día}$) y se minimiza el consumo específico de energía ($< 7,0 \text{ MJ/kg}$).

El sistema presenta su mejor desempeño tecno-económico en condiciones templadas, coincidiendo con un óptimo en 25 °C. Esto sugiere que la operación en Mejillones será naturalmente eficiente durante gran parte del año (primavera/otoño), evitando la necesidad de sistemas auxiliares de pre-enfriamiento o calentamiento del aire de alimentación, lo cual concuerda con las recomendaciones de implementación en zonas desérticas moderadas reportadas por Sendi et al. (2022b).

5.2.3 Efecto de la Temperatura de Desorción

La temperatura de regeneración es la variable que aporta la energía térmica para romper los enlaces químicos entre el CO₂ y la amina. Se evaluó el desempeño variando T_{des} entre 60 y 120 °C, manteniendo constantes las demás variables. Los resultados se presentan en la Figura 5.8 y en la Figura 5.9.

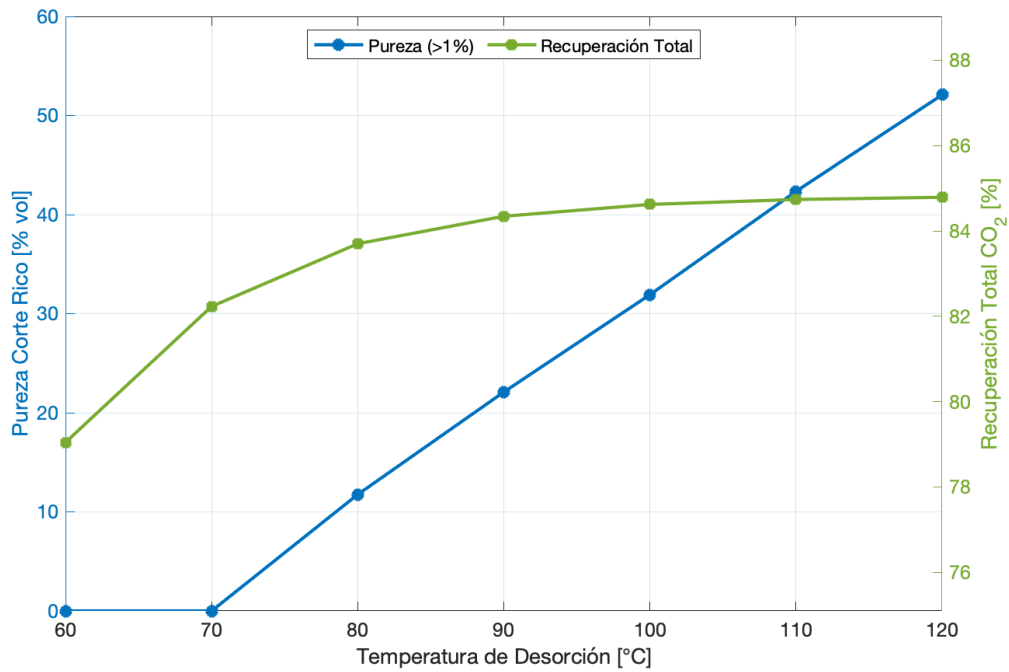


Figura 5.8: Sensibilidad a la temperatura de desorción. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación total.

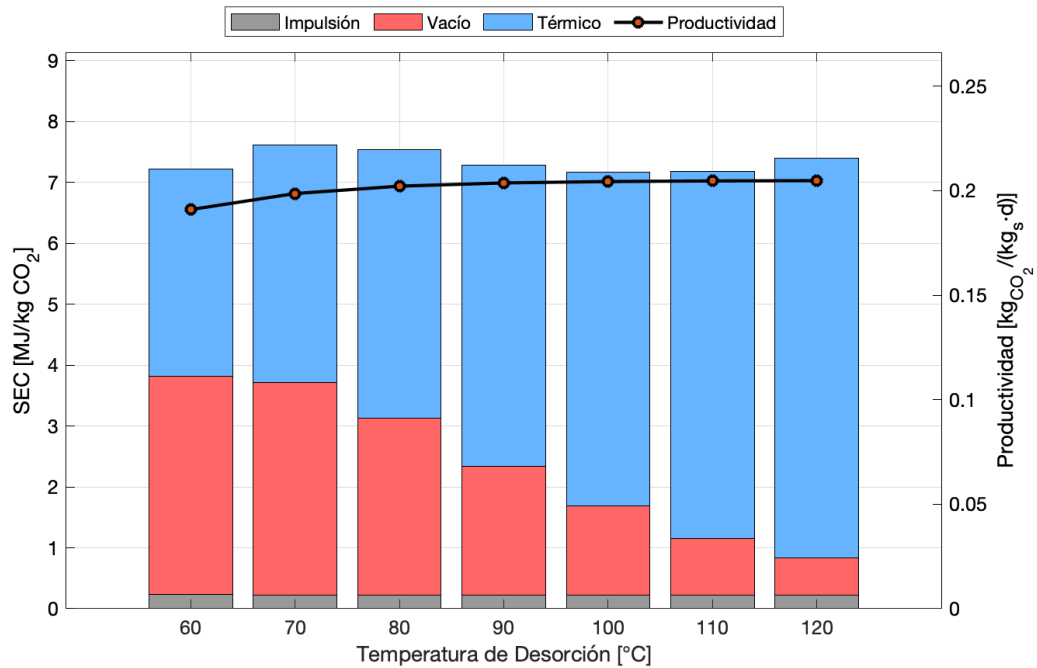


Figura 5.9: Sensibilidad a la temperatura de desorción. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.

El análisis de calidad (Figura 5.8) muestra que temperaturas inferiores a 80 °C son insuficientes para generar una corriente de producto útil. En este rango, la cinética de desorción es tan lenta que la concentración de salida nunca supera el umbral del 1%, resultando en una pureza efectiva nula para el corte rico. Sin embargo, al superar los 80 °C, la pureza aumenta linealmente, alcanzando valores sobre el 50% a 120 °C debido al efecto de “desorción flash” térmica.

Energéticamente (Figura 5.9), se observa una transición en el mecanismo dominante. A bajas temperaturas (60-80 °C), el SEC es elevado ($>7,5$ MJ/kg) y está dominado por el trabajo de vacío (barra roja), ya que la bomba debe operar por tiempos prolongados para extraer el CO₂ que la temperatura no logra liberar. Al aumentar T_{des} hacia 100 °C, el aporte térmico facilita la liberación rápida, reduciendo drásticamente el consumo eléctrico de vacío.

No obstante, por encima de 110 °C, el SEC vuelve a aumentar levemente (7,4 MJ/kg). Esto indica que el costo energético de calentar el lecho a temperaturas más altas (barra azul creciente) supera el beneficio marginal de recuperar el último remanente de CO₂.

Se selecciona 100 °C como la temperatura de regeneración óptima. Este punto minimiza el SEC total ($\approx 7,16$ MJ/kg) y asegura una productividad robusta (0,204 kg CO₂/kg_{sorb}·día), evitando temperaturas excesivas que podrían degradar el sorbente o encarecer los materiales de construcción del contactor.

5.2.4 Efecto del Tiempo de Adsorción

Finalmente, se evaluó el impacto de extender la etapa de carga, variando el criterio de ruptura (C_{out}/C_{in}) desde 0,10 hasta 0,99. Esta variable determina la duración del ciclo y la cantidad de CO₂ cargada en el lecho antes de la regeneración. La Figura 5.10 y la Figura 5.11 muestran lo obtenido.

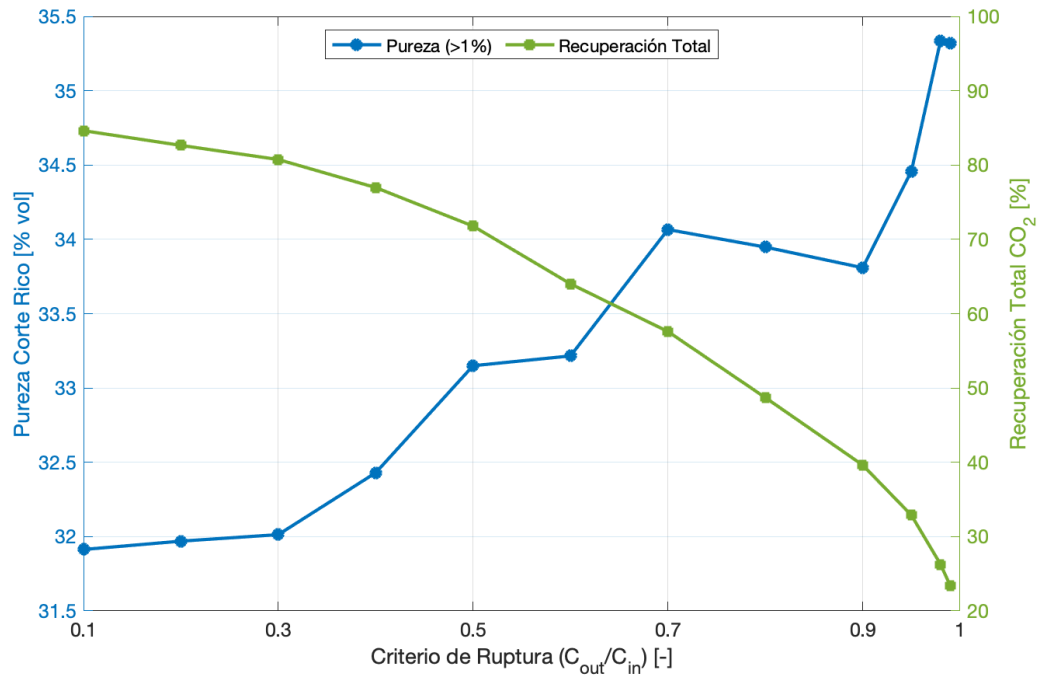


Figura 5.10: Sensibilidad al criterio de ruptura. Compromiso de Calidad: Pureza del corte rico y Recuperación.

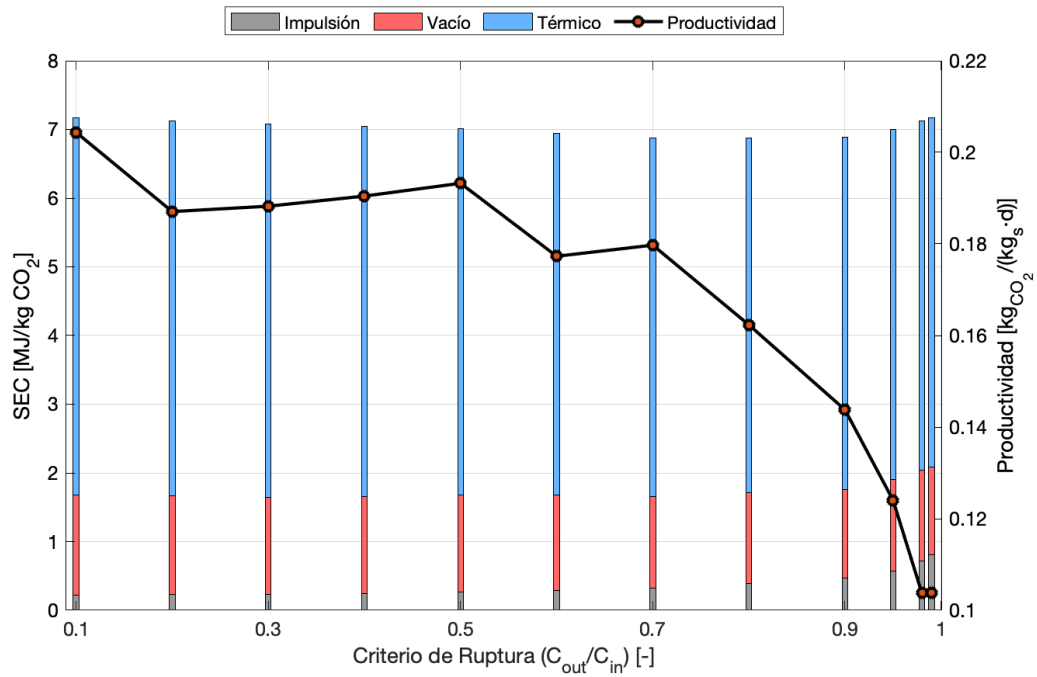


Figura 5.11: Sensibilidad al criterio de ruptura. Compromiso de Eficiencia: Consumo Específico de Energía (SEC) y Productividad.

La Figura 5.10 revela un comportamiento no lineal en la productividad. Se observa un máximo global para ciclos muy cortos con una ruptura de 0,10 ($\text{Prod} \approx 0,205 \text{ kgCO}_2/\text{kg}_{\text{sorb}}/\text{día}$), seguido de un segundo máximo local en torno a una ruptura de 0,50 ($\text{Prod} \approx 0,195 \text{ kgCO}_2/\text{kg}_{\text{sorb}}/\text{día}$). Esto indica que existen dos modos de operación eficientes: uno de ciclaje rápido (aprovechando la cinética inicial rápida) y otro de carga media.

Desde el punto de vista energético, extender el ciclo favorece la eficiencia. En la Figura 5.11 se puede apreciar que el SEC disminuye desde 7,16 MJ/kg (a 0,10) hasta valores inferiores a 7,0 MJ/kg (a 0,50 - 0,70). Esto se debe a que, al cargar más CO_2 por ciclo, se amortiza mejor la energía térmica invertida en calentar la masa inerte del lecho (barra azul), reduciendo el consumo específico.

Sin embargo, el factor limitante es la recuperación (Figura 5.10). Si se opera a rupturas elevadas ($>0,70$) para minimizar el SEC, la recuperación de CO_2 cae por debajo del 60%, lo que implica que gran parte del CO_2 alimentado se pierda, haciendo ineficiente el proceso de captura desde el punto de vista ambiental.

Se selecciona un criterio de ruptura de 0,50 como el punto de diseño final. Comparado con el Caso Base (0,10), este punto reduce el consumo energético a $\approx 7,0 \text{ MJ/kg}$ y mantiene una productividad muy cercana al máximo (apenas un 5% inferior), pero con la ventaja operativa de duplicar la duración del ciclo, lo que reduce el desgaste de las válvulas y equipos de conmutación. En este punto, la recuperación se mantiene en un nivel aceptable del 72%.

5.3 Definición de Escenarios

A partir de los resultados obtenidos en el análisis de sensibilidad, se definieron tres escenarios operativos concretos para proceder con la evaluación económica y el escalamiento industrial. La selección de los parámetros operativos para cada caso se justifica a continuación:

- **Criterio de Ruptura:** Dado que el análisis demostró que un ratio de ruptura de 0,50 ofrece el mejor balance entre productividad y consumo energético, manteniendo una recuperación sobre el 70%, este valor se fijó como constante para todos los escenarios.
- **Escenario A (Eficiencia energética):** Se seleccionó una presión de vacío de 0,70 bar. Según la Figura 5.5, en este punto el SEC disminuye asintóticamente al mínimo ($\approx 5,7 \text{ MJ/kg}$). Se acompaña de una T_{ads} de 20 °C para favorecer la capacidad de carga sin incurrir en costos excesivos de enfriamiento.
- **Escenario B (Base Óptimo):** Corresponde a las condiciones óptimas identificadas: $P_{vac} = 0,30 \text{ bar}$ y $T_{des} = 100 \text{ °C}$. Este punto asegura una pureza de producto aceptable y un consumo energético controlado ($\approx 7,0 \text{ MJ/kg}$).

- **Escenario C (Alta Pureza):** Se intensifican las condiciones a $P_{vac} = 0,20$ bar y $T_{des} = 110$ °C. Aunque esto eleva el SEC, permite maximizar la pureza del corte rico, lo cual podría reducir costos en etapas posteriores de purificación aguas abajo.

La Tabla 5.2 resume las variables operacionales que serán utilizadas para el dimensionamiento de las plantas de 100, 10.000 y 1.000.000 ton CO₂/año.

Tabla 5.2: Parámetros operativos seleccionados para los escenarios de evaluación económica.

Variable	Escenario A	Escenario B	Escenario C
Presión de Vacío (P_{vac})	0,70 bar	0,30 bar	0,20 bar
Temp. Adsorción (T_{ads})	20 °C	30 °C	25 °C
Temp. Desorción (T_{des})	110 °C	100 °C	110 °C
Criterio de Ruptura	0,50	0,50	0,50

Se evaluó el desempeño técnico de los tres escenarios definidos (A, B y C) utilizando el modelo validado con un criterio de ruptura constante de 0,50. La Tabla 5.3 resume los indicadores clave de desempeño (KPIs) obtenidos para cada configuración operativa.

Tabla 5.3: Comparación de indicadores de desempeño (KPIs) para los escenarios evaluados.

Parámetro	Escenario A	Escenario B	Escenario C
Productividad [kg CO ₂ /(kg _{sorb} · día)]	0,209	0,193	0,188
Pureza Corte Rico [% vol]	34,4 %	33,2 %	53,5 %
Recuperación Total [%]	71,9 %	71,8 %	71,2 %
SEC [MJ/kg CO ₂]	6,35	7,01	7,68

El **Escenario A** confirma su efectividad como estrategia de ahorro energético. Al operar con un vacío moderado (0,7 bar), se logra reducir el Consumo Específico de Energía (SEC) a 6,35 MJ/kg, un 9,4% inferior al Caso Base. Sorprendentemente, este escenario también presentó la mayor productividad (0,209 kg CO₂/kg_{sorb}/día), debido a que las condiciones termodinámicas a 20 °C favorecen una carga útil ligeramente mayor por ciclo, sin penalizar excesivamente la cinética.

El **Escenario B** se mantiene como una opción balanceada, con un SEC de 7,01 MJ/kg y una productividad intermedia. La recuperación de CO₂ se mantuvo estable en torno al 71-72% en todos los casos, validando la robustez del criterio de ruptura seleccionado.

El **Escenario C**, diseñado para maximizar la calidad, cumple su objetivo al elevar la pureza del producto hasta un 53,5%, muy superior al $\approx 33\%$ de los otros casos. Esto se logra gracias a la combinación de vacío profundo (0,2 bar) y alta temperatura (110 °C), que genera una fuerza

impulsora de desorción muy agresiva. Sin embargo, esto conlleva un costo energético: el SEC aumenta a 7,68 MJ/kg (un 9,5% más costoso que el base), reflejando el trabajo adicional requerido por las bombas de vacío y el suministro térmico.

La elección entre el Escenario A y C dependerá del costo relativo entre la energía eléctrica/térmica y los requerimientos de purificación aguas abajo. Si la planta cuenta con energía renovable barata pero el tratamiento posterior del CO₂ es costoso, el Escenario C podría ser preferible a pesar de su mayor SEC. Por el contrario, si el objetivo es minimizar el OPEX directo de captura, el Escenario A es el claro ganador.

Por lo tanto es fundamental contrastar la pureza obtenida en los escenarios A y B (33–35%) con los requisitos de las aplicaciones industriales del CO₂. Para el CCS bajo norma ISO 27914, o para la síntesis de e-fuels (como en el proyecto Haru Oni), se requiere una pureza superior al 95%.

La configuración de planta estudiada en el presente trabajo debe, pues, entenderse como un paso de pre-concentración. Para poder alcanzar un grado comercial, la corriente de salida obtenida requeriría un proceso de purificación secundario (como un sistema PSA de segunda etapa o una unidad de compresión criogénica).

Debe tenerse en cuenta que los costos de capital y operación de esta posterior purificación no están incluidos en el LCOD base de 541 USD/t de este trabajo. Según datos de la IEA (2022), un paso de purificación secundario agregaría entre 30 y 80 USD/t adicionales, lo que elevaría el costo nivelado real a un rango estimado de 570 a 620 USD/t en el Escenario A (Costo Medio). Alternativamente, el Escenario C, que logra un 53,5% de pureza base, se perfila como el diseño mínimo viable para reducir los costos de esa etapa de purificación final.

5.4 Escalamiento

A partir de los resultados del modelo, se determinaron los requerimientos físicos para una planta de capacidad comercial (1 Mt CO₂/año). La Tabla 5.4 presenta la infraestructura necesaria para cada escenario. El detalle del escalamiento para las capacidades de 100 y 10.000 ton CO₂/año se encuentra en el Anexo B.

Tabla 5.4: Requerimientos físicos y energéticos para una planta de 1 Mt CO₂/año.

Variable de Dimensionamiento	Escenario A	Escenario B	Escenario C
Número de Módulos	26.717	28.958	29.800
Masa Total de Sorbente [t]	14.534	15.753	16.211
Potencia Ventiladores [MW]	8,9	9,2	9,2
Potencia Vacío [MW]	2,3	49,8	57,0
Potencia Térmica [MW]	212,5	188,1	204,5
Potencia Total Planta [MW]	223,6	247,1	270,6

Se observa que el Escenario A, al ser más productivo (0,209 kgCO₂/kg_{sorb}/d), requiere aproximadamente un 10% menos de módulos (y por ende menos inversión inicial en acero y sorbente) que el Escenario C.

Desde el punto de vista energético, destaca la drástica reducción en la potencia de vacío del Escenario A (2,3 MW) comparado con el C (57,0 MW), consecuencia de operar a 0,7 bar en lugar de 0,2 bar. Esto permite que, a pesar de tener una carga térmica mayor (212,5 MW), la potencia total de la planta sea significativamente menor (223,6 MW vs 270,6 MW), anticipando una ventaja competitiva en el OPEX global.

La diferencia de potencia de vacío total entre el Escenario A (2,3 MW) y el Escenario B (49,8 MW) no se explica únicamente por la relación de compresión paramétrica. Como se puede deducir de la Ecuación 4.12, para llegar al vacío profundo de 0,3 bar es necesario extraer una cantidad de moles bastante superior desde los vacíos del lecho. Al combinar este mayor trabajo volumétrico con el número total de módulos requeridos para la planta, el consumo de la configuración B se amplifica de forma no lineal.

5.5 Evaluación Económica

A partir del dimensionamiento físico y los requerimientos energéticos determinados, se estimaron los costos de capital (CAPEX), costos operativos (OPEX) y el Costo Nivelado de Captura (LCOD) siguiendo la metodología de Peters et al. (2003). Se evaluaron 27 casos considerando tres escenarios operativos, tres escalas de producción y tres niveles de costos (incertidumbre). Los resultados de CAPEX, OPEX y LCOD para cada caso se encuentra en el Anexo C.

5.5.1 Costos de Capital (CAPEX)

La estimación de la inversión de capital se realizó calculando el costo de los equipos principales y la carga inicial de sorbente, para luego aplicar factores de costos directos e indirectos hasta obtener el Capital Fijo y el Capital Total.

La Tabla 5.5 presenta el desglose detallado de la inversión para una planta de escala comercial (1 Mt CO₂/año) bajo un escenario de costos medios, lo cual se considera un escenario representativo.

Tabla 5.5: Desglose de la inversión para planta de 1 Mt CO₂/año (Costo Medio).

Ítem de Inversión [Millones USD]	Escenario A	Escenario B	Escenario C
Equipos Principales			
Contactores (Módulos)	43,6	47,3	48,6
Ventiladores	6,0	6,3	6,4
Bombas de Vacío	1,0	8,7	9,6
Caldera	22,1	19,2	21,4
Carga Inicial Sorbente	363,4	393,8	405,3
Costo Total Equipos	436,1	475,3	491,3
<i>Otros Costos Directos e Indirectos</i>	1.298,8	1.415,5	1.463,3
Capital Fijo	1.734,9	1.890,8	1.954,6
Capital Circulante	303,6	330,9	342,1
CAPITAL TOTAL	2.038,5	2.221,6	2.297,7

Para visualizar la estructura de costos de los equipos principales, la Figura 5.12 presenta la distribución porcentual para el Caso Base (Escenario B) a escala industrial, considerando un costo medio.

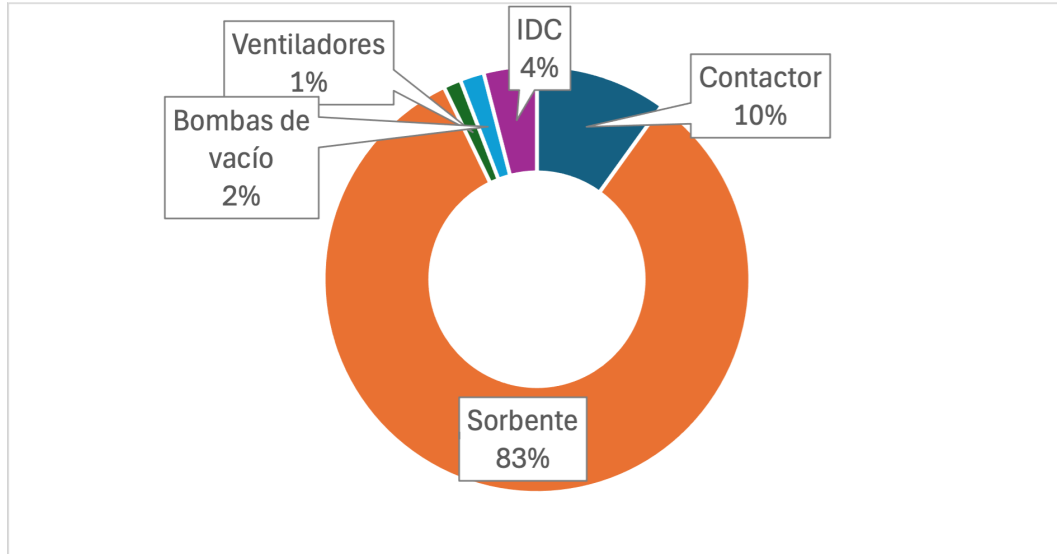


Figura 5.12: Distribución del costo directo de equipos para el Escenario B (Caso Base) a 1 Mt CO₂/año, costo medio. Se excluyen los costos indirectos para resaltar la proporción de los componentes tecnológicos.

El gráfico confirma que la tecnología S-DAC es intensiva en inventario químico más que en maquinaria pesada. En el Caso Base, la carga inicial de sorbente representa aproximadamente el 83% del costo directo de equipamiento, relegando a los contactores ($\approx 10\%$) y el resto de equipos ($\approx 10\%$) a un segundo plano. Esto se condice con lo reportado en la literatura, ya que un estudio de Bos et al. (2020) reporta que casi un 70% del costo de capital está relacionado al costo del sorbente.

Esto demuestra que la viabilidad del CAPEX depende críticamente de la vida útil y el costo unitario del adsorbente. Una reducción en el precio del sorbente tendría un impacto mucho mayor en la inversión inicial que cualquier optimización mecánica en los ventiladores o contactores.

La Figura 5.13 representa la comparación de costo directo de equipamiento para los 9 casos de estudio a escala industrial (1 Mt CO₂/año), permitiendo visualizar simultáneamente el efecto del escenario operativo y la incertidumbre de costos.

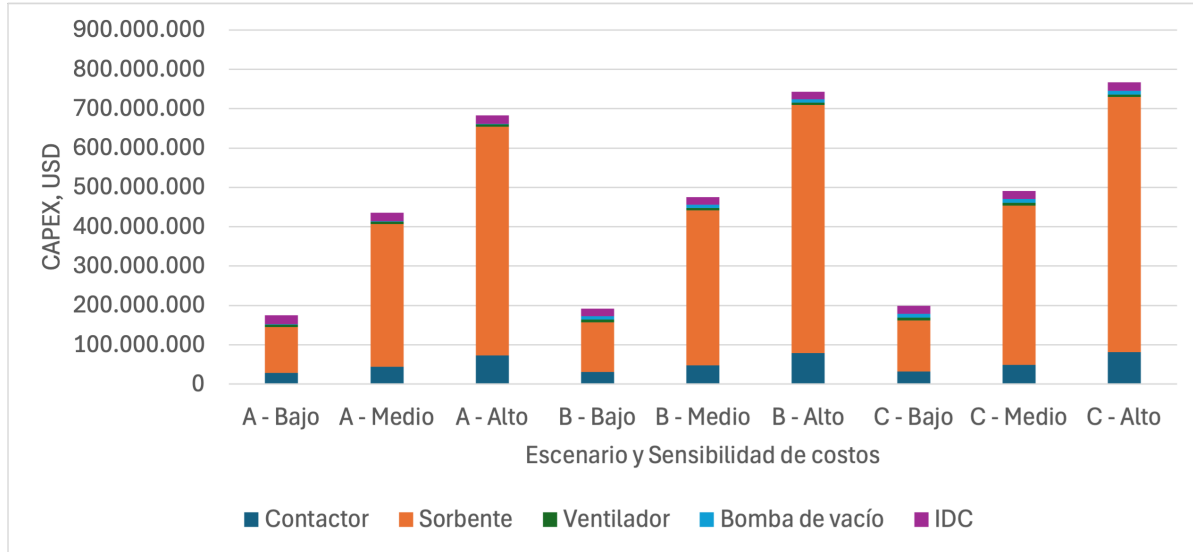


Figura 5.13: Comparación de la distribución de costos de los equipos principales para los 9 casos a escala de 1 Mt CO₂/año.

Al analizar el gráfico, se puede notar que para un mismo escenario operativo (por ejemplo, el Escenario A), se observa una variabilidad significativa dependiente de las condiciones de mercado (precio del sorbente y materiales). El caso de costo Bajo presenta una inversión aproximadamente un 60% menor respecto al caso Medio, mientras que el nivel Alto conlleva un sobrecosto cercano al 36%. Esto indica que la viabilidad del proyecto es altamente dependiente de la capacidad de asegurar precios competitivos para el sorbente y contactor. Al fijar el nivel de incertidumbre (por ejemplo, costo Bajo) y comparar los Escenarios A, B y C, se aprecia que la distribución de costos es cualitativamente similar, con el sorbente como componente mayoritario. Sin embargo, la diferencia principal radica en el sistema de vacío. Mientras que en el Escenario A el costo de las bombas es casi imperceptible, en los Escenarios B y C este ítem crece sustancialmente. En concreto, el paso de un vacío moderado (A) a uno profundo (C) implica un aumento de un 90% en el costo de los equipos de impulsión.

Finalmente, se evaluó el efecto de la capacidad de producción sobre la eficiencia de la inversión. La Figura 5.14 presenta la evolución del CAPEX anualizado (amortización de la inversión) por tonelada de CO₂ capturada.

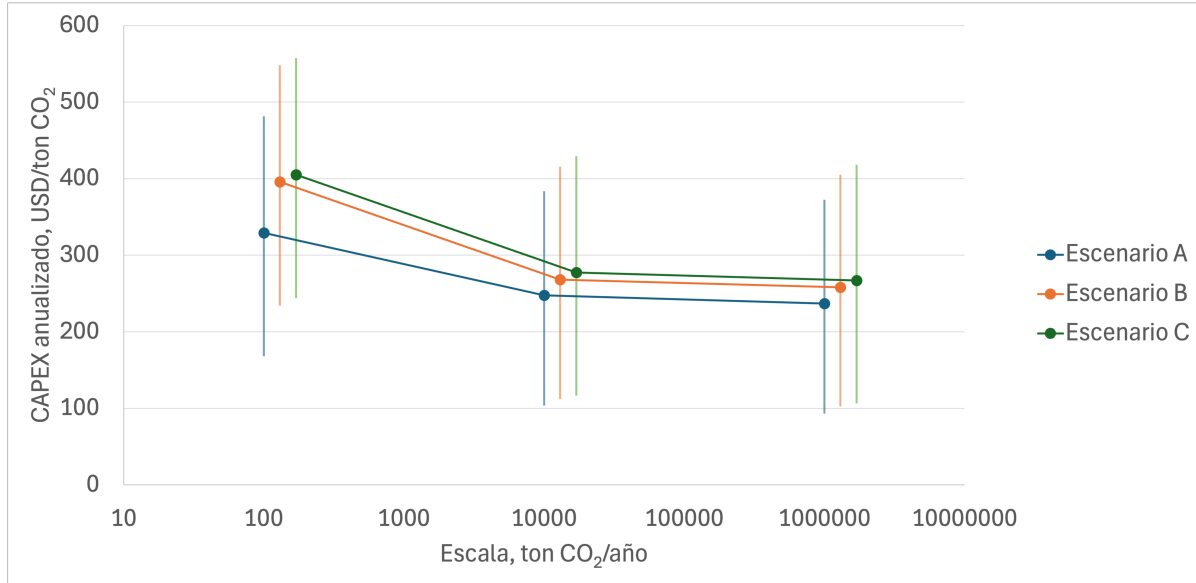


Figura 5.14: Evolución del CAPEX anualizado en función de la capacidad de planta para los tres escenarios. Las barras verticales representan la sensibilidad a la incertidumbre de costos.

El gráfico demuestra una clara tendencia decreciente en los costos unitarios de capital al aumentar la capacidad instalada, lo que demuestra la economía de escala. Se observa que el impacto de la inversión inicial se diluye significativamente al pasar de la escala piloto a la comercial, estabilizándose hacia el 1.000.000 de toneladas anuales. Esto se explica porque, si bien los módulos de contacto escalan linealmente, los costos de infraestructura auxiliar (edificios, líneas de transmisión, preparación de terreno) e ingeniería se amortizan sobre un volumen de producción mucho mayor.

Comparativamente, el Escenario A se consolida sistemáticamente como la opción más eficiente en capital a lo largo de todas las escalas. La curva del Escenario A se mantiene siempre por debajo de los Escenarios B y C, confirmando que la estrategia de simplificar el sistema de vacío (0,7 bar) genera una ventaja en el costo de capital anualizado.

5.5.2 Costos Operativos (OPEX)

La estimación de los costos operativos anuales integró el consumo de servicios (energía eléctrica y térmica), la reposición del material adsorbente debido a su degradación cíclica, y los costos fijos asociados a la operación, mantenimiento y administración de la planta.

La Tabla 5.6 presenta el desglose detallado de estos costos para la escala industrial (1 Mt CO₂/año) bajo el escenario de costos medios. En ella, los costos unitarios [USD/tCO₂] se calculan dividiendo el costo anual por la capacidad de diseño neta de la planta ($F_{target}=1.000.000$ ton CO₂/año). Se aclara que el Factor de Capacidad (CF=0,90) ya está contemplado de manera integrada en el cálculo y simulación dinámica de los módulos en MATLAB para garantizar dicha

producción neta anual, por lo tanto, la base del denominador del LCOD permanece constante y no varía con las horas de apagado programadas.

Tabla 5.6: Desglose detallado de costos operativos anuales y unitarios (1 Mt CO₂/año, Costo Medio).

Ítem de Costo	Costo Anual [M USD/año]			Costo Unitario [USD/tCO ₂]		
	Esc. A	Esc. B	Esc. C	Esc. A	Esc. B	Esc. C
Consumo Energético						
Ventiladores (Aire)	4,9	5,1	5,1	4,9	5,1	5,1
Bombas de Vacío	1,2	27,5	31,5	1,2	27,5	31,5
Energía Térmica	46,6	41,2	44,7	46,6	41,2	44,7
Subtotal Energía	52,7	73,8	81,3	52,7	73,8	81,3
Otros Costos Operativos						
Reposición Sorbente	90,8	98,5	101,3	90,8	98,5	101,3
Costos Fijos*	157,7	173,2	179,4	157,7	173,2	179,4
OPEX TOTAL	301,2	345,4	362,0	301,2	345,4	362,0

*Incluye mantenimiento, mano de obra y otros.

Por un lado, para profundizar en la estructura de costos, en la Figura 5.15 se presenta el desglose porcentual de los costos operacionales globales para el Escenario B a escala industrial, considerando un costo medio. Por otro lado, la Figura 5.16 muestra el desglose porcentual del consumo puramente energético.

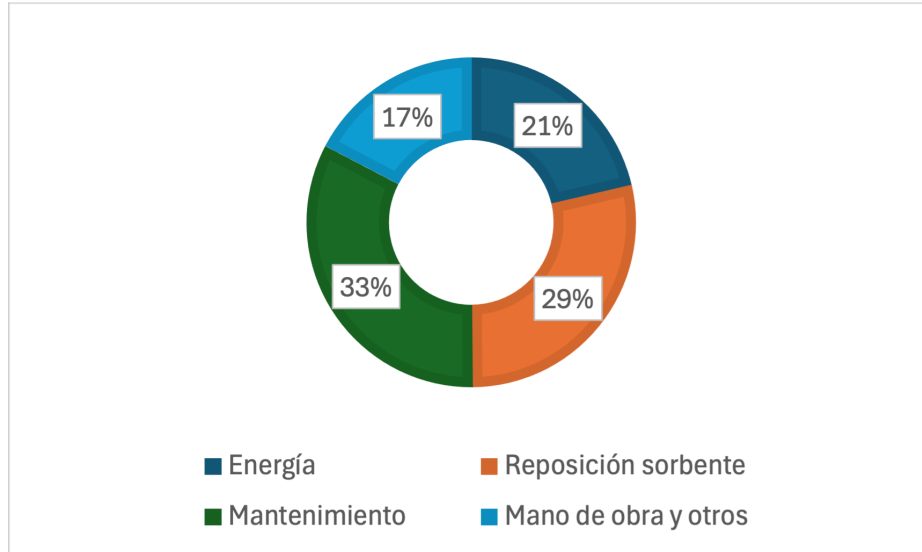


Figura 5.15: Distribución del costo operativo para el Escenario B a escala de 1 Mt CO₂/año a costo medio: Participación de los ítems principales en el OPEX total.

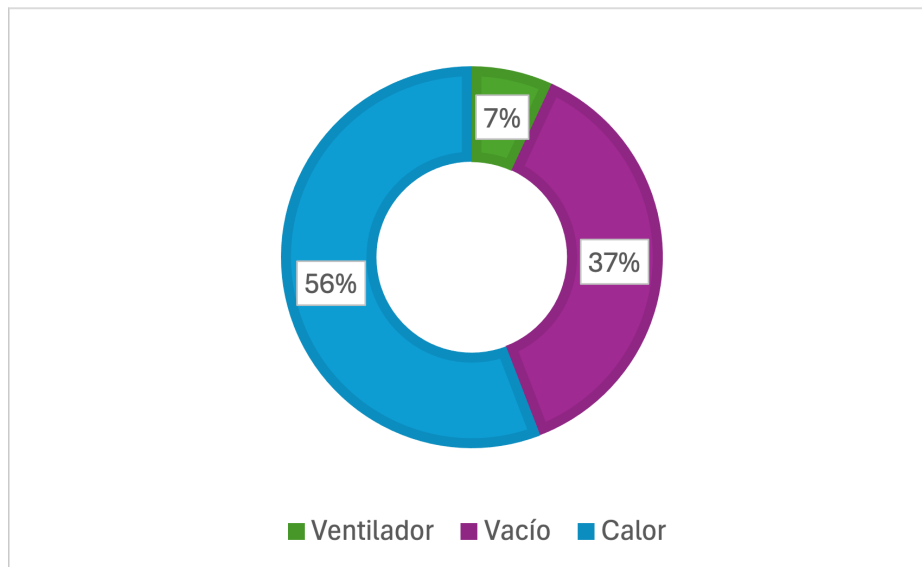


Figura 5.16: Distribución del costo operativo para el Escenario B a escala de 1 Mt CO₂/año a costo medio: Participación de los servicios en el OPEX puramente energético.

El análisis de la distribución global (Figura 5.15) revela que el proceso DAC es intensivo en mantenimiento y materiales, más que puramente energético. El mantenimiento (33%) y la reposición de sorbente (29%) suman en conjunto más del 60% del presupuesto anual. Esto indica que la viabilidad del proyecto depende críticamente de la durabilidad de los equipos mecánicos y la vida útil del material adsorbente. A pesar de ser un proceso termodinámico, el costo de la energía representa el 21% del total, situándose por debajo de los costos de mantenimiento.

Sin embargo, al analizar exclusivamente el componente energético (Figura 5.16), se identifican los impulsores clave del consumo. El suministro de calor (gas natural) es el factor dominante, abarcando el 56% del costo energético, lo cual es consistente con la alta demanda de vapor para la regeneración del sorbente a ≈ 100 °C. Se aproxima al valor reportado por Bos et al. (2020), el cual reporta que el calentamiento del sorbente corresponde a un 45% del costo operativo total. En el Escenario B, el sistema de vacío representa un 37% de la factura energética, una cifra significativa que supera ampliamente el costo de ventilación (7%). Esta alta participación del vacío justifica la exploración de alternativas de menor vacío (Escenario A) para optimizar el OPEX.

La Figura 5.17 ilustra la sensibilidad del costo operativo total ante la incertidumbre de precios y la configuración del proceso.

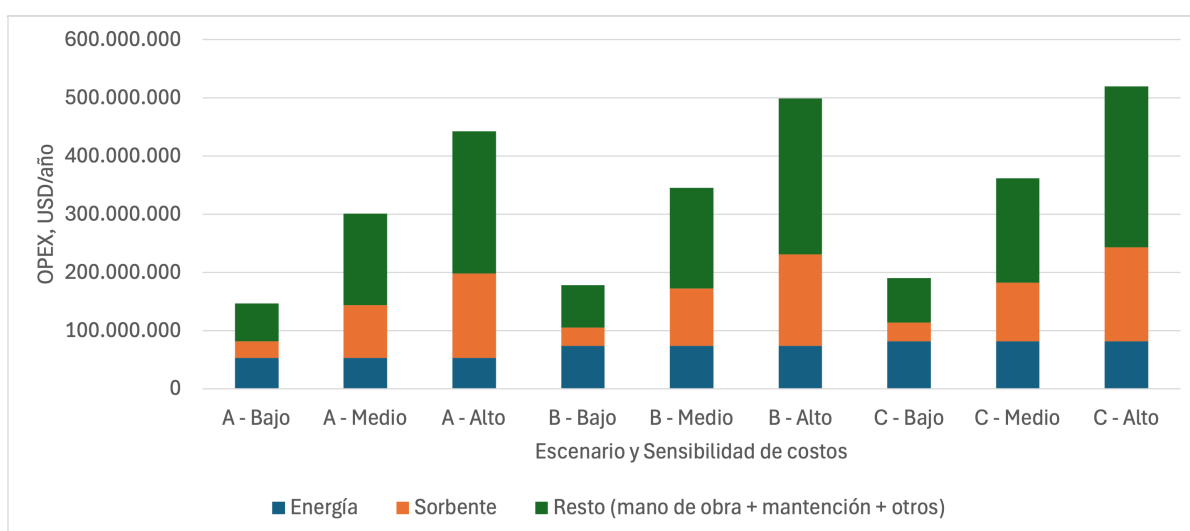


Figura 5.17: Comparación del OPEX anual a escala industrial (1 Mt) bajo distintos escenarios operativos y niveles de costos.

Como se aprecia en la Figura 5.17, la energía no es el mayor costo. La viabilidad operativa depende críticamente de controlar los costos fijos y asegurar un precio competitivo para la reposición del sorbente.

La Figura 5.18 hace un “zoom” exclusivo al costo energético unitario, desglosando el consumo en sus tres componentes críticos: ventilación, vacío y calor.

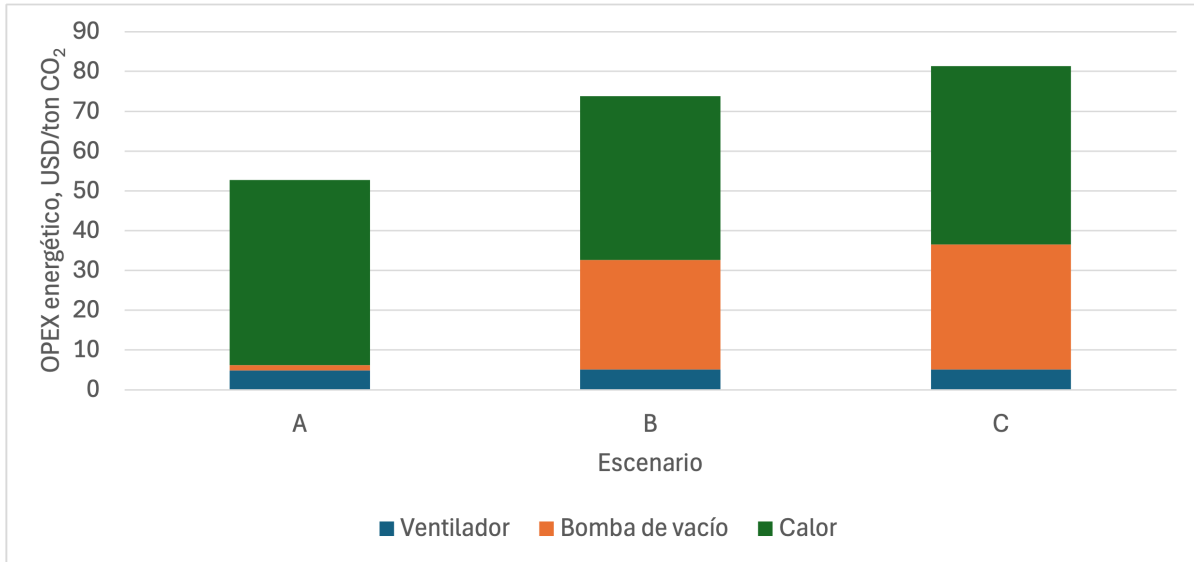


Figura 5.18: Desglose del costo energético unitario a escala industrial, costos medios.

La Figura 5.18 demuestra que operar a 0,7 bar (Escenario A) reduce el costo de energía de vacío de ≈ 31 USD/ton (en el C) a solo ≈ 1 USD/ton. Este ahorro de 30 dólares por tonelada es una ventaja técnica estructural que se mantiene en todas las escalas productivas.

La comparación de ambas figuras permite concluir que, mientras la incertidumbre financiera (Figura 5.17) está gobernada por el precio del sorbente, la optimización técnica (Figura 5.18) se logra minimizando la potencia de vacío. El Escenario A logra esto último sin penalizar el consumo térmico, validando su elección como la configuración operativa óptima.

Finalmente, la Figura 5.19 ilustra la evolución del costo operativo unitario en función de la capacidad de captura, permitiendo visualizar el efecto de la economía de escala sobre el OPEX.

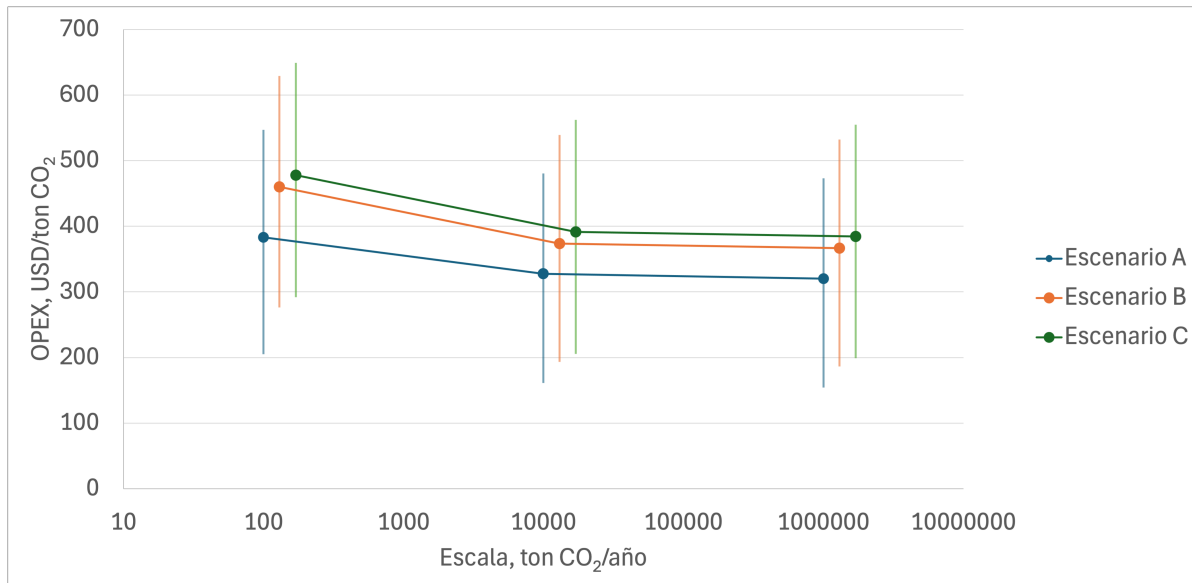


Figura 5.19: Evolución del OPEX unitario en función de la escala para los tres escenarios. Las líneas verticales representan la sensibilidad a la incertidumbre de costos

Del gráfico se desprende una tendencia análoga a la observada previamente en los costos de inversión (CAPEX anualizado, Figura 5.14):

Se evidencia una disminución notable del costo unitario al pasar de la escala piloto a la demostrativa. En la etapa de 100 ton CO₂/año, los costos fijos (especialmente mano de obra y administración) poseen un peso desproporcionado sobre la baja producción, elevando artificialmente el costo unitario. Al escalar a 10.000 ton CO₂/año, estos costos fijos se diluyen, generando la caída más pronunciada de la curva.

No obstante, al transitar hacia la escala industrial, la reducción de costos se vuelve marginal y la curva tiende a estabilizarse. Esto ocurre porque a gran escala el OPEX pasa a estar dominado por los costos variables (energía y sorbente), los cuales crecen linealmente con la producción y no ofrecen grandes ventajas por escala.

En todo el rango evaluado, el Escenario A presenta sistemáticamente los menores costos, confirmando que la ventaja operativa obtenida por la optimización del vacío se mantiene vigente tanto en etapas tempranas de desarrollo como en la operación comercial masiva.

5.5.3 Costo Nivelado de Captura (LCOD)

El indicador final de competitividad económica es el LCOD, el cual integra tanto el esfuerzo de inversión inicial (anualizado mediante el CRF) como los costos operativos recurrentes.

Como punto de partida, la Tabla 5.7 presenta los valores obtenidos para la escala industrial bajo condiciones de costos medios.

Tabla 5.7: Resumen del LCOD para la planta de 1 Mt CO₂/año (Costo Medio).

Componente [USD/tCO ₂]	Esc. A	Esc. B	Esc. C
CAPEX Anualizado	239	261	270
OPEX Total	301	345	362
LCOD TOTAL	541	606	632

Dado que el proyecto está sujeto a variabilidades tanto de escala como de precios de mercado, la Figura 5.20 presenta un mapa de calor que resume el LCOD calculado para los 27 casos de estudio.

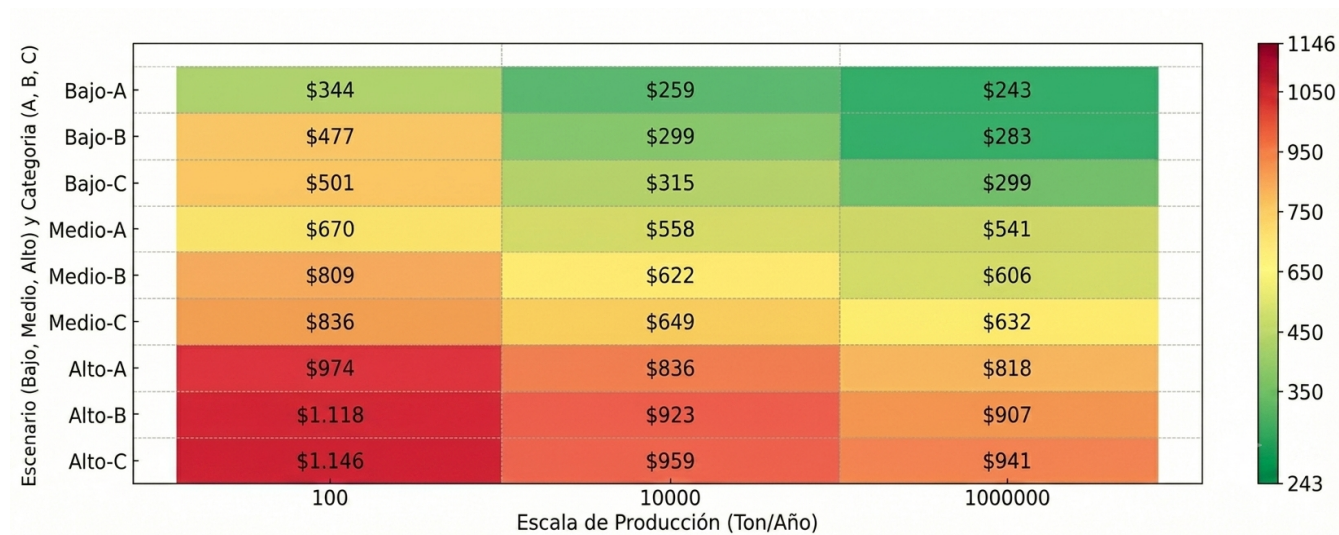


Figura 5.20: Mapa de calor del LCOD para todos los casos evaluados. La intensidad del color refleja la magnitud del costo.

Se observa un gradiente claro: los costos disminuyen drásticamente hacia la escala industrial (columna derecha), hacia el costo bajo (zona superior) y hacia el Escenario A (primera fila superior). El rango de variación es amplio, desde valores sobre los 1.000 USD/ton en escalas piloto con costos altos, hasta un óptimo cercano a los 250 USD/ton en el mejor caso industrial.

Para entender qué componente pesa más en este costo final, la Figura 5.21 desglosa el LCOD en sus dos grandes aportes: Inversión (CAPEX) y Operación (OPEX) para la escala de 1 Mt.

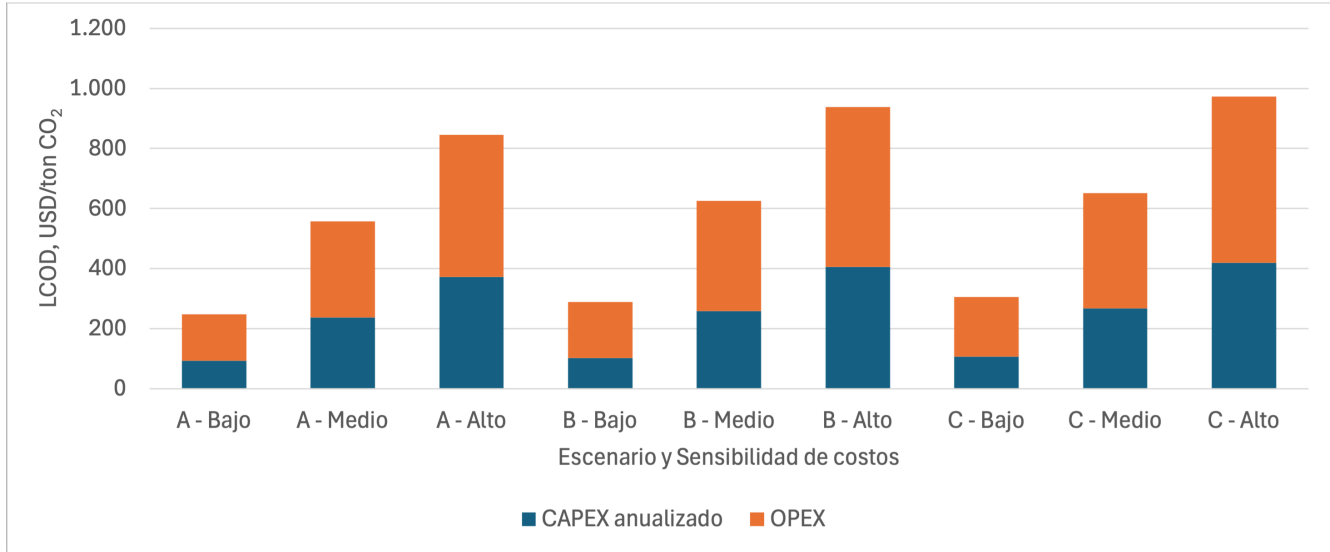


Figura 5.21: Composición del LCOD a escala industrial (1 Mt CO₂/año).

El análisis de la Figura 5.21 revela que en la mayoría de los casos, los costos operativos representan entre el 55% y el 60% del costo total de captura. Esto subraya la importancia de la eficiencia energética y la durabilidad del sorbente por sobre la mera reducción de la inversión inicial. La reducción de altura en las barras del Escenario A proviene de un doble ahorro: menor inversión en bombas de vacío (CAPEX) y menor consumo eléctrico (OPEX), consolidándolo como la opción más robusta.

Precisamente, para cuantificar el impacto crítico de la estabilidad del material adsorbente mencionado, se realizó un análisis de sensibilidad específico sobre su vida útil para el caso central (Escenario A, escala de 1 Mt CO₂/año, costos medios). Se contrastó el caso base de 4 años frente a un escenario de alta degradación (2 años) y uno de alta estabilidad (6 años), cuyos impactos en la estructura de costos se resumen en la Tabla 5.8.

Tabla 5.8: Sensibilidad del LCOD frente a variaciones en la vida útil del sorbente (Escenario A, Costo Medio, Escala 1 Mt CO₂/año).

Vida útil del sorbente	CAPEX Anualizado [USD/tCO ₂]	OPEX [USD/tCO ₂]	LCOD Total [USD/tCO ₂]
2 años (Pesimista)	239	400	639
4 años (Base)	239	301	541
6 años (Optimista)	239	268	508

Como se observa en la Tabla 5.8, una reducción del 50% en la durabilidad del material eleva el LCOD en un 18% (639 USD/t), mientras que extender su estabilidad hasta los 6 años reduce

el costo global a 508 USD/t. Esto demuestra que la degradación física del sorbente es el driver operativo más sensible del modelo económico.

El Factor de Recuperación de Capital (CRF) empleado para anualizar la inversión inicial depende en gran medida de la tasa de descuento (i) que se utilice, la cual es un índice del riesgo financiero del proyecto. Para tecnologías emergentes como S-DAC, los inversionistas institucionales pueden requerir tasas de retorno superiores al caso base convencional del 10%. Por ello, se evaluó el comportamiento del LCOD en el Escenario A (escala de 1 Mt CO₂/año, costos medios) ante tasas del 5% (financiamiento preferencial o subsidio gubernamental) y 15% (capital de riesgo de alto impacto), resumiendo los impactos en la Tabla 5.9.

Tabla 5.9: Sensibilidad del LCOD frente a variaciones en la tasa de descuento (Escenario A, Costo Medio, Escala 1 Mt CO₂/año)).

Tasa de Descuento (i)	CRF	CAPEX Anualizado [USD/tCO ₂]	LCOD Total [USD/tCO ₂]
5% (Financiamiento blando)	0,0802	164	465
10% (Caso Base)	0,1175	239	541
15% (Capital de Riesgo)	0,1598	326	627

Los resultados mostrados en la Tabla 5.9 demuestran que un aumento en la tasa de descuento al 15% eleva el LCOD a 627 USD/tCO₂, porque se encarece el costo del capital penalizado por el riesgo. Por el contrario, un escenario de financiamiento preferencial o tasas verdes (5%) reduce el valor de captura a 465 USD/tCO₂, evidenciando que la creación de marcos regulatorios y subsidios que minimicen los riesgos de inversión es tan crítico para la viabilidad de la planta en Mejillones como las optimizaciones técnicas del proceso.

Finalmente, la Figura 5.22 integra todos los análisis anteriores en un solo gráfico de tendencias, mostrando la evolución del costo con la capacidad y las barras de error asociadas a la incertidumbre de precios (Rango Bajo-Alto).

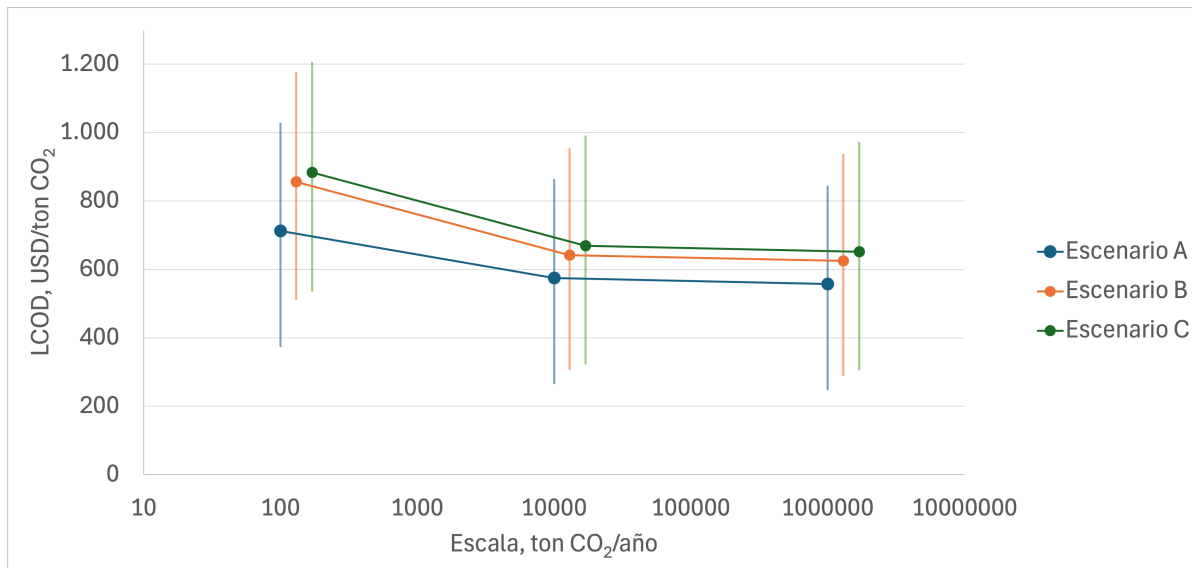


Figura 5.22: Evolución del LCOD en función de la capacidad de planta para los tres escenarios. Las barras verticales representan la sensibilidad a la incertidumbre de costos.

Este gráfico permite concluir que la economía de escala es el factor más determinante para la viabilidad de la tecnología DAC. El costo unitario se reduce en más de un 50% al pasar de la planta piloto a la comercial.

Asimismo, se observa que las barras de incertidumbre (la distancia vertical entre el costo bajo y alto) son significativas, lo que indica que, incluso a gran escala, el precio final dependerá fuertemente de asegurar contratos favorables para el suministro de sorbente y energía. A pesar de esta incertidumbre, el Escenario A se mantiene consistentemente por debajo de las curvas de los escenarios B y C, validando que la optimización del vacío a 0,7 bar es una estrategia recomendable bajo cualquier condición de mercado proyectada.

Para contextualizar globalmente estos resultados y ofrecer un ancla económica clara, la Tabla 5.10 contrasta el LCOD calculado en este estudio para la escala industrial (1 Mt CO₂/año) con los precios actuales de los mercados de carbono, los incentivos gubernamentales internacionales y las metas de costo proyectadas por la Agencia Internacional de Energía (IEA).

Tabla 5.10: Comparación del LCOD calculado frente a precios de referencia y proyecciones internacionales.

Referencia Económica / Mercado	USD/tCO ₂	Contexto / Tipo de Mecanismo
Mercado voluntario de carbono	10–50	Precios actuales basados en naturaleza
EU-ETS (Mercado regulado Europeo)	~60–80	Costo de emisión industrial actual
Crédito Fiscal 45Q (EE.UU.)	~180	Subsidio estatal directo para DAC
Proyección S-DAC IEA (2040)	100–300	Meta de costo por curva de aprendizaje
Este trabajo (Esc. A, 1 Mt, Medio)	541	Modelo base industrial en Mejillones
Este trabajo (Esc. A, 1 Mt, Bajo)	243	Escenario optimista (reducción sorbente)

El análisis comparativo demuestra que, si bien el costo base de 541 USD/tCO₂ es muy superior a los valores de los mercados de compensación y créditos convencionales vigentes, se sitúa de forma competitiva dentro del rango tecnológico inicial proyectado para soluciones de remoción de alta integridad en etapas tempranas de escalamiento. De la misma manera, ante reducciones en el costo del sorbente (caso bajo de 243 USD/tCO₂), la tecnología desarrollada en este trabajo se posiciona fuertemente para competir en los mercados internacionales de bonos de carbono tecnológicos y capturar los incentivos globales proyectados para la próxima década.

5.6 Modelo Empírico de Predicción de Costos

A partir de los resultados obtenidos para la configuración óptima (Escenario A), se desarrolló un conjunto de correlaciones empíricas para predecir el comportamiento del LCOD en función de la escala productiva (S , en tCO₂/año).

Se ajustaron los datos a un modelo de potencia con término asintótico ($LCOD(S) = L_{\infty} + \beta \cdot S^{-\alpha}$), definiendo una banda de predicción delimitada por las condiciones de mercado medias y favorables:

1. Modelo de Referencia (Costos Medios): Representa la tecnología bajo las condiciones actuales de mercado.

$$LCOD_{med}(S) = 538,0 + 869,9 \cdot S^{-0,409} \quad (5.1)$$

2. Modelo de Potencial Futuro (Costos Bajos): Representa el límite económico alcanzable

con una cadena de suministro madura (sorbentes y contactores a costo reducido).

$$LCOD_{low}(S) = 239,3 + 556,3 \cdot S^{-0,363} \quad (5.2)$$

El modelo predice que, por más que se aumente la escala más allá de 1 Mt/año, el costo tiende asintóticamente a un valor piso (que oscila entre ≈ 240 USD/ton (optimista) y 540 USD/ton (conservador) según el escenario de precios). En este punto, las economías de escala de los costos fijos se vuelven despreciables frente a los costos variables (energía y sorbente), los cuales imponen un límite termodinámico y material insuperable.

La curva muestra que la mayor reducción de costos ocurre antes de las 10.000 t/año. Al pasar de la escala demostrativa (10.000 t) a la industrial (1 Mt), el costo solo se reduce marginalmente (entre un 3% y un 6%). Esto sugiere que la tecnología es altamente modular y no requiere necesariamente de mega-proyectos para ser competitiva, alcanzando eficiencias cercanas al óptimo ya en escalas intermedias.

Es importante resaltar que los modelos representados por las Ecuaciones 5.1 y 5.2 son de naturaleza estrictamente interpolativa. Al ajustarse tres parámetros libres (L_∞ , β y α) a tres puntos de datos de escala (100, 10.000 y 1.000.000 tCO₂/año), el sistema matemático se encuentra con cero grados de libertad estadísticos. Estas correlaciones, por tanto, no constituyen herramientas de predicción estadística global y su validez queda estrictamente limitada al rango evaluado (100 a 1.000.000 tCO₂/año). Su principal utilidad radica en ilustrar de forma continua la tendencia asintótica del LCOD hacia la escala industrial a medida que los costos fijos se van diluyendo.

5.7 Análisis del impacto de la humedad relativa en una planta real

El modelo matemático desarrollado en esta memoria parte como supuesto simplificativo básico del establecimiento de condiciones de aire seco, con el objetivo de aislar y validar la cinética intrínseca del CO₂ sobre la amina. Sin embargo, para una eventual implementación industrial en Mejillones, es imperativo considerar el efecto del vapor de agua, ya que la zona costera presenta una Humedad Relativa (HR) promedio anual cercana al 60%. De acuerdo con la literatura para la resina Lewatit VP OC 1065 (Young et al. (2021)), operar con una HR del 60% produce una coadsorción competitiva de agua que reduce la capacidad efectiva de carga de CO₂ en un rango estimado entre el 25% y el 35% debido a la ocupación de sitios activos.

Si bien este porcentaje de reducción no fue considerado, debido a que se decidió utilizar un modelo simple e idealizado, es posible estimar el impacto real que tendría la coadsorción de agua en una planta. Para ello, se postula brevemente el siguiente análisis de sensibilidad directo sobre

los KPIs:

1. **Productividad y Módulos:** Una reducción del 30% en la capacidad de adsorción reduciría de forma proporcional la productividad neta de la planta. Para mantener la meta de captura de 1 Mt CO_2 /año en el Escenario A, el número de módulos contactores requeridos teóricamente crecería en el orden del 30% (desde 26.700 módulos a cerca de 34.700 módulos).
2. **Costos:** Este aumento en la cantidad de equipos impactaría en el CAPEX directo de la planta. Aplicando los mismos factores de escala económicos, el LCOD del Escenario A (costos medios) se estima que aumentaría, con el valor pasando de 541 USD/ton CO_2 hasta un rango cercano a 650 - 680 USD/ton CO_2 .
3. **SEC:** El SEC térmico de la planta se incrementaría considerablemente. Esto se debe a que la regeneración del sorbente necesitaría energía adicional no solo para calentar el agua coadsorbida (calor sensible), sino principalmente para aportar el calor latente de vaporización necesario para evaporarla y removerla del lecho durante la etapa de desorción. En la práctica, esto puede aumentar la demanda térmica total en un 40% a un 60% respecto al caso base seco, lo cual reduce la eficiencia energética del proceso en conjunto.

Es posible constatar, por tanto, que la omisión del agua hace que los resultados de este trabajo se definan como un Caso Base Ideal u óptimo técnico. La inclusión explícita de la penalización por humedad es un paso crítico para el desarrollo de ingenierías de detalle futuras, lo que permite acotar los márgenes de diseño económico para instalaciones DAC en el borde costero chileno.

Capítulo 6

Conclusiones y Recomendaciones

6.1 Conclusiones

Se desarrolló y validó con éxito un modelo fenomenológico 1D para la simulación dinámica del ciclo TVSA con Lewatit VP OC 1065, con errores inferiores al 6,1 % en las tres etapas independientes de validación. Estos resultados corroboran la viabilidad técnica del proceso S-DAC bajo condiciones representativas del norte de Chile. Desde el punto de vista económico, el costo nivelado de captura estimado de 541 USD/ton CO₂ para el Escenario A a escala comercial (1 Mton CO₂/año, nivel de costo medio) está alineado con el rango proyectado por la IEA para la etapa inicial de despliegue de tecnologías DAC, lo que posiciona al proceso como económicamente promisorio. La determinación formal de la factibilidad de inversión demandará un análisis de flujo de caja con indicadores financieros (VAN, TIR, Payback, etc...) como extensión natural de este trabajo.

El análisis comparativo determinó que la tecnología S-DAC (adsorción con sorbentes sólidos), operada mediante un ciclo TVSA (*Temperature Vacuum Swing Adsorption*) utilizando sorbentes funcionalizados con aminas (en este caso Lewatit VP OC 1065), es la opción más adecuada en el contexto chileno, por sobre L-DAC (absorción con solventes líquidos). Esta selección se fundamenta en el menor requerimiento energético, menor consumo de agua, su modularidad y su capacidad de operar con temperaturas de regeneración moderadas (aprox. 100 °C), facilitando su integración con fuentes de energía renovable o calor industrial residual. Con respecto al estudio de las isothermas y la cinética, se comprobó que el modelo de Toth y la cinética Dual-Site describen con precisión el comportamiento del material, validando su uso para predecir la captura eficiente de CO₂ en condiciones atmosféricas.

La modelación y simulación en MATLAB permitió caracterizar exitosamente la dinámica del proceso bajo condiciones climáticas de Mejillones. El análisis de sensibilidad reveló que la presión y la temperatura de desorción son variables críticas del sistema, identificando el Escenario A (Eficiencia Energética) como la configuración operativa óptima. Al operar con un vacío moderado

de 0,7 bar y una temperatura de adsorción de 20 °C, se logró maximizar la productividad (0,209 kg CO₂/kg_{sorb}·día) y minimizar el consumo de energía a 6,35 MJ/kg CO₂.

Finalmente, la evaluación económica estimó los costos de inversión (CAPEX) y operación (OPEX), la cual evidenció que la viabilidad del proyecto depende fuertemente de la economía de escala. Los resultados muestran que el costo nivelado de captura (LCOD) se reduce drásticamente al pasar de una planta piloto a una escala industrial de 1 Mt CO₂/año, disminuyendo desde valores superiores a los 1.000 USD/tCO₂ hasta un valor de 541 USD/tCO₂ (Escenario A, costos medios). Si bien este costo supera ampliamente los precios actuales de los mercados de carbono regulados y voluntarios convencionales (10–80 USD/tCO₂), se alinea de manera consistente con las proyecciones internacionales de la IEA para las etapas tempranas de escalamiento de la tecnología S-DAC (100–600 USD/tCO₂). De este modo, la competitividad del valor obtenido debe entenderse bajo el contexto de una trayectoria de costos en fase de optimización global, lo que justifica el desarrollo de capacidades técnicas locales para la futura inserción de Chile en el mercado global de remoción de alta integridad. Incluso, se proyecta un escenario a futuro con costos optimistas de 243 USD/tCO₂, el cual solo sería alcanzable si se reducen los costos relacionados al sorbente. El desglose de costos destacó que este material es el costo dominante en todo el ciclo de vida del proyecto: representa aproximadamente el 83% de la inversión inicial en equipamiento (CAPEX) y, a su vez, su reposición periódica constituye el factor mayoritario de los costos operativos (OPEX), superando incluso al consumo energético. Esto concluye que los esfuerzos futuros de I+D deben centrarse prioritariamente en disminuir el costo de adquisición del material y extender su vida útil para hacer competitiva la tecnología.

6.2 Recomendaciones

Se sugiere perfeccionar el modelo matemático del ciclo TVSA para acercarlo a una operación industrial real. Este trabajo simplificó el proceso en etapas de adsorción y desorción. No obstante, se recomienda incorporar explícitamente las etapas transitorias (*blowdown*, calentamiento y enfriamiento/presurización). Esto permitiría evaluar con mayor precisión los tiempos muertos y el consumo energético real. Asimismo, desde el punto de vista cinético, es recomendable introducir la dependencia de la temperatura en las constantes de adsorción y desorción de la amina mediante expresiones tipo Arrhenius, superando la limitación actual de utilizar valores ajustados a una temperatura fija (30 °C).

Para aumentar la representatividad de la simulación, es crítico integrar el fenómeno de competencia por sitios activos. Esto implica modelar la coadsorción de agua (H₂O) y su impacto en la demanda energética de regeneración. En este sentido, se insta a incorporar un nuevo KPI: el consumo específico de agua (en m³ H₂O/tCO₂ capturado). Esto permitiría evaluar la huella

hídrica del proceso en zonas de escasez como el norte de Chile. Adicionalmente, se debería evaluar el efecto de contaminantes industriales (como NO_x , SO_x o material particulado) presentes en zonas como Mejillones, los cuales podrían degradar el sorbente y afectar la eficiencia de captura.

En cuanto al diseño de equipos, se recomienda ampliar el análisis de sensibilidad e incluir parámetros geométricos e hidrodinámicos. Futuros trabajos deberían comparar la configuración de lecho empacado frente a estructuras de monolitos, evaluando su impacto en la caída de presión y el consumo de ventiladores. Variables como el radio de los pellets, la velocidad superficial del aire y la altura del lecho deben ser optimizadas en conjunto, buscando el equilibrio técnico-económico entre la cinética del transporte y los costos operativos (OPEX). En este sentido, se sugiere transitar desde el enfoque paramétrico de una variable a la vez (OAT) utilizado en este trabajo hacia una metodología de superficie de respuesta (RSM) o un análisis factorial completo. Esto permitiría capturar las interacciones cruzadas y el acoplamiento termodinámico intrínseco entre variables críticas (como la temperatura de desorción T_{des} y la presión de vacío P_{vac}), logrando identificar el óptimo global del espacio de diseño multidimensional con mayor precisión.

Por otro lado, considerando la ubicación estratégica de Mejillones propuesta, resulta indispensable estudiar la integración energética del sistema. Se sugiere evaluar el acople de la planta DAC con fuentes de energía renovable variable (como la solar fotovoltaica), analizando el impacto de la intermitencia en la continuidad del ciclo y la necesidad de almacenamiento térmico. A su vez, se debe explorar la posibilidad de establecer una sinergia con el sector industrial de Mejillones para el aprovechamiento de calor residual. Esto podría sustituir la generación de vapor y reducir drásticamente los costos operativos.

Finalmente, para validar el propósito fundamental de esta tecnología, se debe realizar un Análisis de Ciclo de Vida (LCA) completo. Es imperativo cuantificar las emisiones indirectas asociadas a DAC, específicamente aquellas asociadas a la quema de gas natural en calderas para la generación de vapor. Este análisis permitirá determinar si el balance de carbono es efectivamente negativo, asegurando que las emisiones generadas por la operación no neutralicen la cantidad de CO_2 capturado desde el aire en el proceso.

Referencias

- Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID) (2023). Científicos estudian la dinámica del CO₂ en Biobío y Ñuble con mirada transdisciplinaria. Accedido el: 8 de julio de 2025.
- Aljishi, S., Alyami, S., Alghorabi, E., Faltakh, H., Zentou, H., et al. (2025). Techno-Economic Assessment of Hybrid Renewable Energy Systems for Direct Air Capture in Saudi Arabia. *Sustainability*, 17(17):7659.
- Barkakaty, B., Sumpter, B. G., Ivanov, I. N., Potter, M. E., Jones, C. W., and Lokitz, B. S. (2017). Emerging materials for lowering atmospheric carbon. *Environmental Technology & Innovation*, 7:30–43.
- Ben-Mansour, R., Habib, M., Bamidele, O., Basha, M., Qasem, N., Peedikakkal, A., Laoui, T., and Ali, M. (2016). Carbon capture by physical adsorption: Materials, experimental investigations and numerical modeling and simulations – A review. *Applied Energy*, 161:225–255.
- Berger, A. H. and Bhowan, A. S. (2011). Comparing physisorption and chemisorption solid sorbents for use separating co₂ from flue gas using temperature swing adsorption. *Energy Procedia*, 4:562–567. 10th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies.
- Bos, M., Kersten, S., and Brilman, D. (2020). Wind power to methanol: Renewable methanol production using electricity, electrolysis of water and co₂ air capture. *Applied Energy*, 264:114672.
- Bui, M., Adjiman, C. S., Bardow, A., Anthony, E. J., Boston, A., Brown, S., Fennell, P. S., Fuss, S., Galindo, A., Hackett, L. A., Hallett, J. P., Herzog, H. J., Jackson, G., Kemper, J., Krevor, S., Maitland, G. C., Matuszewski, M., Metcalfe, I. S., Petit, C., Puxty, G., Reimer, J., Reiner, D. M., Rubin, E. S., Scott, S. A., Shah, N., Smit, B., Trusler, J. P. M., Webley, P., Wilcox, J., and Dowell, N. M. (2018). Carbon capture and storage (CCS): The way forward. *Energy and Environmental Science*, 11:1062–1176.
- Burhenne, L., Giacomini, C., Follett, T., Ritchie, J., McCahill, J. S., and Mérida, W. (2017). Characterization of reactive CaCO₃ crystallization in a fluidized bed reactor as a central process of direct air capture. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 5:5968–5977.

- Carbon Neutral+ (2025). ¿qué es la captura y almacenamiento de carbono? Imagen: Comparación entre métodos de captura de carbono: CCS vs DAC.
- Climeworks (2023). Supercharging carbon removal: a focus on direct air capture technology. Technical report, Climeworks.
- Climeworks (2025). Our Journey: Scaling Direct Air Capture to Gigaton capacity. Climeworks AG. Cronología y hoja de ruta de proyectos. Accedido: 2025.
- Comisión Nacional de Energía (2025). Reporte Mensual del Sector Energético: Diciembre 2025. Technical Report Vol. 130, Ministerio de Energía, Gobierno de Chile. Información de precios de nudo y mercado del gas. Accedido: Enero 2026.
- Didas, S. A., Kulkarni, A. R., Sholl, D. S., and Jones, C. W. (2012). Role of Amine Structure on Carbon Dioxide Adsorption from Ultradilute Gas Streams such as Ambient Air. *ChemSusChem*, 5(10):2058–2064.
- Garza, D., Dargusch, P., and Wadley, D. (2023). A technological review of direct air carbon capture and storage (daccs): Global standing and potential application in australia.
- Gebald, C., Meier, W., Repond, N., Ruesch, T., and Wurzbacher, J. A. (2015). Direct air capture device.
- Gebald, C., Piatkowski, N., Ruesch, T., and Wurzbacher, J. A. (2014). Low-pressure drop structure of particle adsorbent bed for adsorption gas separation process.
- Ghiri, M. N., Nasriani, H. R., Khajenoori, L., Mohammadkhani, S., and Williams, K. S. (2025). Dynamic temperature–vacuum swing adsorption for sustainable direct air capture: Parametric optimisation for high-purity co₂ removal. *Sustainability*, 17(15).
- Herzog, H. (2022). Direct Air Capture. In Bui, M. and Dowell, N. M., editors, *Greenhouse Gas Removal Technologies*, page 0. The Royal Society of Chemistry.
- HIF Global (2024). HIF Global comienza la instalación de la primera unidad de captura directa de aire en Chile.
- Hunt, C. (2024). DAC Unpacked: The Ultimate Guide to Direct Air Capture Technology. Publicado en Abatable. Consultado el 8 de junio de 2025.
- IEA (2022). Direct air capture: A key technology for net zero. Technical report, IEA.
- IPCC (2019). Calentamiento global de 1,5 °C.

IPCC (2022). IPCC AR6 WGI: CDR Factsheet.

Jiang, L., Liu, W., Wang, R. Q., Gonzalez-Diaz, A., Rojas-Michaga, M. F., Michailos, S., Pourkashanian, M., Zhang, X. J., and Font-Palma, C. (2023). Sorption-based direct air capture with CO₂ utilization. *Chemical Engineering Journal*, 452:139427.

Jiang, L., Roskilly, A., and Wang, R. (2018). Performance exploration of temperature swing adsorption technology for carbon dioxide capture. *Energy Conversion and Management*, 165:396–404.

Kim, S.-M. and Léonard, G. (2022). Performance and sensitivity analysis of direct air capture (dac) model using solid amine sorbents for co₂ capture. *SSRN Electronic Journal*.

Kishibayev, K., Serafin, J., Tokpayev, R., Khavaza, T., Atchabarova, A., Abduakhytova, D., Ibraimov, Z., and Sreńscek-Nazzal, J. (2021). Physical and chemical properties of activated carbon synthesized from plant wastes and shungite for CO₂ capture. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(6):106798.

Lai, J. Y., Ngu, L. H., and Hashim, S. S. (2021). A review of CO₂ adsorbents performance for different carbon capture technology processes conditions. *Greenhouse Gases: Science and Technology*, 11(5):1076–1117.

LANXESS (2024). Lewatit® VP OC 1065. Accedido el 4 de julio de 2025.

Li, G. and Yao, J. (2024). Direct air capture (dac) for achieving net-zero co₂ emissions: Advances, applications, and challenges. *Eng*, 5:1298–1336.

Luukkonen, A., Elfving, J., and Inkeri, E. (2023). Improving adsorption-based direct air capture performance through operating parameter optimization. *Chemical Engineering Journal*, 471:144525.

Medinilla, M. (2025). Chile amplía el mercado eléctrico: ACEN proyecta precios de USD 70 por MWh para 2026. *Energía Estratégica*. Proyecciones de precios para clientes libres (ACEN).

Monroe, R. (2025). The Keeling Curve.

Nikulshina, V., Gebald, C., and Steinfeld, A. (2009). CO₂ capture from atmospheric air via consecutive CaO-carbonation and CaCO₃-calcination cycles in a fluidized-bed solar reactor. *Chemical Engineering Journal*, 146(2):244–248.

Nikulshina, V., Gálvez, M., and Steinfeld, A. (2007). Kinetic analysis of the carbonation reactions for the capture of CO₂ from air via the Ca(OH)₂–CaCO₃–CaO solar thermochemical cycle. *Chemical Engineering Journal*, 129(1):75–83.

- Nilsson, M. (2024). Advancing Carbon Neutrality: Techno-economic analysis of Direct Air Capture at commercial scale. Master’s thesis, School of Business, Society and Engineering, Mälardalen University. Accedido: Enero 2025.
- Ozkan, M. (2021). Direct air capture of co₂: A response to meet the global climate targets. *MRS Energy and Sustainability*, 8:51–56.
- Ozkan, M., Nayak, S. P., Ruiz, A. D., and Jiang, W. (2022). Current status and pillars of direct air capture technologies. *ISCIENCE*, 25:103990.
- Peters, M. S., Timmerhaus, K. D., and West, R. E. (2003). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*. McGraw-Hill Chemical Engineering Series. McGraw-Hill, 5th edition.
- Petersen, S. B., Forbes, E., Sawada, J. A., and Pedersen, T. H. (2026). Lewatit 1065 VP OC for direct air capture; an analysis of adsorption characteristics using dynamic column breakthrough. *Separation and Purification Technology*, 380:135224. Disponible en línea como acceso anticipado (Early Access).
- Plaza, M., García, S., Rubiera, F., Pis, J., and Pevida, C. (2010). Post-combustion CO₂ capture with a commercial activated carbon: Comparison of different regeneration strategies. *Chemical Engineering Journal*, 163(1):41–47.
- Ribeiro, R., Grande, C., and Rodrigues, A. (2012). Electrothermal performance of an activated carbon honeycomb monolith. *Chemical Engineering Research and Design*, 90(11):2013–2022.
- Ritchie, H. and Roser, M. (2024). CO₂ emissions.
- Sabatino, F., Grimm, A., Gallucci, F., van Sint Annaland, M., Kramer, G. J., and Gazzani, M. (2021). A comparative energy and costs assessment and optimization for direct air capture technologies. *Joule*, 5(8):2047–2076.
- Schellevis, H., van Schagen, T., and Brilman, D. (2021). Process optimization of a fixed bed reactor system for direct air capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 110:103431.
- Sendi, M., Bui, M., Dowell, N. M., and Fennell, P. (2022a). Regional techno-economic analysis of different solid sorbent-based direct air capture configurations. In *16th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies (GHGT-16)*, Lyon, France. Electronic copy available at SSRN.
- Sendi, M., Bui, M., Mac Dowell, N., and Fennell, P. (2022b). Geospatial analysis of regional climate impacts to accelerate cost-efficient direct air capture deployment. *One Earth*, 5(10):1153–1164.

- Shafeeyan, M. S., Daud, W. M. A. W., and Shamiri, A. (2014). A review of mathematical modeling of fixed-bed columns for carbon dioxide adsorption. *Chemical Engineering Research and Design*, 92(5):961–988.
- Sing, K. S. W. (1985). Reporting physisorption data for gas/solid systems with special reference to the determination of surface area and porosity (recommendations 1984). *Pure and Applied Chemistry*, 57(4):603–619.
- Siqueira, R. M., Freitas, G. R., Peixoto, H. R., do Nascimento, J. F., Musse, A. P. S., Torres, A. E., Azevedo, D. C., and Bastos-Neto, M. (2017). Carbon Dioxide Capture by Pressure Swing Adsorption. *Energy Procedia*, 114:2182–2192. 13th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies, GHGT-13, 14-18 November 2016, Lausanne, Switzerland.
- Sistema de Información Nacional de Calidad del Aire (2025). Registros meteorológicos horarios: Estación Mejillones. Base de datos en línea. Accedido en 2025.
- UNFCCC (2025). El Acuerdo de París.
- Wood, K. R., Liu, Y. A., and Yu, Y. (2018). *Simulation of Adsorption Processes*, chapter 1, pages 1–153. John Wiley & Sons, Ltd.
- Wu, K., Ye, Q., Wu, R., and Dai, H. (2020). Alkali metal-promoted aluminum-pillared montmorillonites: High-performance CO₂ adsorbents. *Journal of Solid State Chemistry*, 291:121585.
- Wu, X., Krishnamoorti, R., and Bollini, P. (2022). Technological options for direct air capture: A comparative process engineering review. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, 13(Volume 13, 2022):279–300.
- Young, J., García Díez, E., García, S., and Van der Spek, M. (2021). The impact of binary water–CO₂ isotherm models on the optimal performance of sorbent-based direct air capture processes. *Energy & Environmental Science*, 14:5377–5394.
- Young, J., McQueen, N., Charalambous, C., Foteinis, S., Hawrot, O., Ojeda, M., et al. (2023). The cost of direct air capture and storage can be reduced via strategic deployment but is unlikely to fall below stated cost targets. *One Earth*, 6(7):899–917.
- Zbair, M. and Bennici, S. (2021). Survey summary on salts hydrates and composites used in thermochemical sorption heat storage: A review. *Energies*, 14:3105.

- Zhao, R., Deng, S., Zhao, L., Zhao, Y., Li, S., Zhang, Y., and Yu, Z. (2017a). Experimental study and energy-efficiency evaluation of a 4-step pressure-vacuum swing adsorption (PVSA) for CO₂ capture. *Energy Conversion and Management*, 151:179–189.
- Zhao, R., Zhao, L., Deng, S., Song, C., He, J., Shao, Y., and Li, S. (2017b). A comparative study on CO₂ capture performance of vacuum-pressure swing adsorption and pressure-temperature swing adsorption based on carbon pump cycle. *Energy*, 137:495–509.

Apéndice A

Deducción Fenomenológica de los Balances de Materia

En este Anexo se detalla la deducción de las ecuaciones gobernantes para el transporte de materia en la columna de adsorción, partiendo desde los principios fundamentales de conservación de masa aplicados a un volumen de control diferencial.

A.1 Definición del Sistema y Volumen de Control

Se considera una columna de lecho fijo de longitud L_b y radio interno r_b , empacada con partículas esféricas de adsorbente. Para el análisis, se define un volumen de control diferencial de espesor Δz ubicado en una posición axial arbitraria z , tal como se ilustra en la Figura A.1.

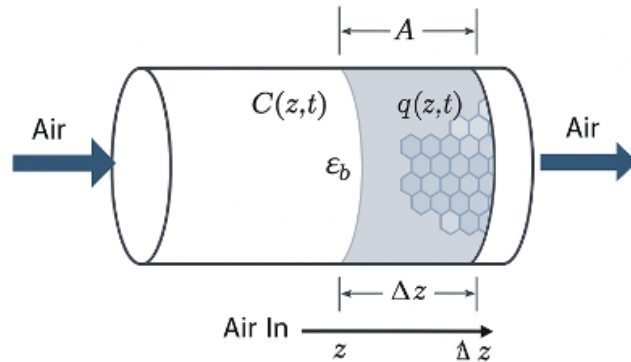


Figura A.1: Volumen de control diferencial para el balance de masa en el lecho fijo.

Las propiedades del lecho se asumen uniformes en la dirección radial (modelo 1D). Se definen las siguientes variables:

- $C(z, t)$: Concentración de CO_2 en la fase gas $[\text{mol}/\text{m}_{\text{gas}}^3]$.
- $q(z, t)$: Carga promedio de CO_2 en el sólido $[\text{mol}/\text{kg}_{\text{sólido}}]$.
- ϵ_b : Porosidad del lecho (fracción de vacío).
- ρ_p : Densidad de partícula $[\text{kg}/\text{m}_{\text{sólido}}^3]$.
- v : Velocidad intersticial del gas $[\text{m}/\text{s}]$.
- D_L : Coeficiente de dispersión axial $[\text{m}^2/\text{s}]$.
- A : Área transversal de la columna (πr_b^2) .

A.2 Balance de Masa en Fase Gaseosa

La ecuación general de conservación de masa establece que:

$$\text{Acumulación} = \text{Entrada} - \text{Salida} - \text{Transferencia al Sólido} \quad (\text{A.1})$$

Considerando que la fase gas ocupa una fracción ϵ_b del volumen total, la acumulación de moles de CO_2 en el volumen de control $A\Delta z$ durante un intervalo de tiempo dt es:

$$\frac{\partial n_g}{\partial t} = \epsilon_b A \Delta z \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\text{A.2})$$

El flujo molar total en la dirección axial, N_z , incluye tanto el transporte convectivo como el dispersivo (Ley de Fick para dispersión):

$$N_z = vC - D_L \frac{\partial C}{\partial z} \quad (\text{A.3})$$

La entrada neta de materia al volumen de control por flujo axial se obtiene restando el flujo en $z + \Delta z$ del flujo en z . Aplicando una expansión de serie de Taylor truncada al primer término para $N_z(z + \Delta z)$:

$$N_z(z)A - N_z(z + \Delta z)A \approx N_z(z)A - \left(N_z(z) + \frac{\partial N_z}{\partial z} \Delta z \right) A = -\frac{\partial N_z}{\partial z} A \Delta z \quad (\text{A.4})$$

La transferencia de masa desde la fase gas hacia la fase sólida se define mediante un término fuente volumétrico J $[\text{mol}/(\text{m}_{\text{lecho}}^3 \cdot \text{s})]$:

$$\text{Consumo por adsorción} = JA\Delta z \quad (\text{A.5})$$

Sustituyendo estos términos en la ecuación de balance global y dividiendo por el volumen $A\Delta z$:

$$\epsilon_b \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial N_z}{\partial z} - J \quad (\text{A.6})$$

Reemplazando la expresión del flujo N_z :

$$\epsilon_b \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} \left(vC - D_L \frac{\partial C}{\partial z} \right) - J \quad (\text{A.7})$$

Asumiendo que el coeficiente de dispersión D_L y la velocidad v son constantes en el tramo diferencial:

$$\epsilon_b \frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial z} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = -J \quad (\text{A.8})$$

A.3 Balance de Masa en Fase Sólida

El volumen de sólido en el elemento diferencial es $(1 - \epsilon_b)A\Delta z$. La masa de adsorbente contenida es $(1 - \epsilon_b)\rho_p A\Delta z$. La acumulación de CO_2 en el sólido se relaciona directamente con la velocidad de cambio de la carga q :

$$\text{Acumulación Sólido} = (1 - \epsilon_b)\rho_p A\Delta z \frac{\partial q}{\partial t} \quad (\text{A.9})$$

Dado que la única fuente de CO_2 para el sólido es la transferencia desde el gas (término J), se cumple que:

$$(1 - \epsilon_b)\rho_p \frac{\partial q}{\partial t} = J \quad (\text{A.10})$$

Sustituyendo J en la Ecuación A.8, obtenemos la ecuación acoplada gas-sólido en términos de concentración:

$$\epsilon_b \frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial z} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = -(1 - \epsilon_b)\rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (\text{A.11})$$

A.4 Formulación en Fracción Molar (Modelo de Petersen)

Para la implementación numérica y consistencia con el modelo de referencia (Petersen et al., 2026), es conveniente expresar el balance en términos de fracción molar y_{CO_2} . Utilizando la ley de los gases ideales:

$$C = \frac{P}{RT} y_{\text{CO}_2} \quad (\text{A.12})$$

Sustituyendo C en la Ecuación A.11 y asumiendo condiciones isobáricas ($\partial P / \partial z = 0$, $\partial P / \partial t = 0$)

e isotérmicas ($\partial T/\partial z = 0, \partial T/\partial t = 0$) para la simplificación de los términos de transporte:

$$\epsilon_b \frac{P}{RT} \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial t} + v \frac{P}{RT} \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial z} - D_L \frac{P}{RT} \frac{\partial^2 y_{CO_2}}{\partial z^2} = -(1 - \epsilon_b) \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (\text{A.13})$$

Multiplicando toda la ecuación por $\frac{RT}{P\epsilon_b}$ y reordenando, se obtiene la expresión final utilizada en el modelo computacional:

$$\frac{\partial y_{CO_2}}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 y_{CO_2}}{\partial z^2} - \frac{v}{\epsilon_b} \frac{\partial y_{CO_2}}{\partial z} - \frac{RT}{P} \frac{(1 - \epsilon_b)}{\epsilon_b} \rho_p \frac{\partial q}{\partial t} \quad (\text{A.14})$$

Esta ecuación describe la evolución temporal y espacial de la fracción molar de CO_2 , donde el término $\partial q/\partial t$ se resuelve localmente mediante el modelo cinético *Dual-Site* descrito en el cuerpo principal de la memoria.

Apéndice B

Detalle del Escalamiento Industrial

La Tabla B.1 presenta el desglose de los requerimientos físicos y energéticos para todas las escalas evaluadas. Se detalla la potencia requerida por cada subsistema (impulsión, vacío y térmico) para dimensionar los suministros de planta.

Tabla B.1: Dimensionamiento físico y desglose de potencia para los tres escenarios.

Escenario	Cap. [t/año]	Nº Mod	Masa Sorb. [ton]	P. Fan [MW]	P. Vacío [MW]	P. Térmica [MW]	P. Total [MW]
A (Eficiencia)	100	3	1,5	0,001	0,0002	0,02	0,02
	10.000	267	145	0,09	0,02	2,12	2,24
	1.000.000	26.717	14.534	8,91	2,25	212,5	223,6
B (Base)	100	3	1,6	0,001	0,005	0,02	0,02
	10.000	290	158	0,09	0,50	1,88	2,47
	1.000.000	28.958	15.753	9,21	49,8	188,1	247,1
C (Alta Pureza)	100	3	1,6	0,001	0,006	0,02	0,03
	10.000	298	162	0,09	0,57	2,04	2,71
	1.000.000	29.800	16.211	9,15	57,0	204,5	270,6

Apéndice C

Resultados Económicos Detallados

La Tabla C.1 detalla los costos para la combinación de los tres escenarios operativos (A, B, C), las tres escalas de producción y los tres niveles de incertidumbre de costos, es decir, un resumen consolidado de los costos para los 27 casos de estudio evaluados.

Tabla C.1: Resumen de costos de capital, operación y nivelados para los 27 casos.

Escenario y Caso	Nivel Costo	Escala [tCO ₂ /a]	CAPEX Total [USD]	OPEX Total [USD/a]	LCOD [\$/t]	CAPEX An. [\$/t]	OPEX Unit. [\$/t]
Escala Piloto (100 t/año)							
A	Bajo	100	135 k	18 k	344	159	185
A	Medio	100	272 k	35 k	670	320	350
A	Alto	100	402 k	50 k	974	472	502
B	Bajo	100	192 k	25 k	477	225	251
B	Medio	100	337 k	42 k	809	396	422
B	Alto	100	459 k	58 k	1.118	539	579
C	Bajo	100	200 k	27 k	501	235	266
C	Medio	100	337 k	44 k	836	396	439
C	Alto	100	467 k	60 k	1146	549	598
Escala Pequeña (10.000 t/año)							
A	Bajo	10 k	9,1 M	1,5 M	259	106	153
A	Medio	10 k	21,3 M	3,1 M	558	250	308
A	Alto	10 k	32,9 M	4,5 M	836	386	450
B	Bajo	10 k	9,8 M	1,8 M	299	115	184
B	Medio	10 k	23,9 M	3,5 M	622	280	351
B	Alto	10 k	35,6 M	5,1 M	923	418	505
C	Bajo	10 k	10,2 M	2,0 M	315	120	196
C	Medio	10 k	23,9 M	3,7 M	649	280	368
C	Alto	10 k	36,8 M	5,3 M	959	432	527
Escala Industrial (1.000.000 t/año)							
A	Bajo	1 Mt	815 M	147 M	243	96	147
A	Medio	1 Mt	2.038 M	301 M	541	239	301
A	Alto	1 Mt	3.193 M	443 M	818	375	443
B	Bajo	1 Mt	896 M	178 M	283	105	178
B	Medio	1 Mt	2.296 M	345 M	606	270	345
B	Alto	1 Mt	3.473 M	499 M	907	408	499
C	Bajo	1 Mt	932 M	190 M	299	110	190
C	Medio	1 Mt	2.296 M	362 M	632	270	362
C	Alto	1 Mt	3.585 M	520 M	941	421	520

Nota: k = Miles, M = Millones.