



Research Paper

Machine Learning Model for Predicting the Performance of Activated Carbon Column for the Removal of Volatile Organic Compounds (VOCs)

Mita Nurhayati^{1,2} · Bum Ui Hong³ · Ho Geun Kang⁴ · Sungyun Lee^{1,5,*}

¹Department of Advanced Science and Technology Convergence, Kyungpook National University

²Department of Chemistry, Indonesia University of Education, Indonesia

³Bio Resource Center, Institute for Advanced Engineering

⁴BIN-TECH KOREA Co., Ltd. ⁵Department of Environmental and Safety Engineering, Kyungpook National University

(Received August 11, 2023; Revised September 5, 2023; Accepted September 6, 2023)

Objectives: In this study, a performance prediction model for a pilot-scale VOC adsorption column was developed using ANN algorithm. We compared the prediction accuracy of the mathematical models (Thomas model and Yan model) and the multiple linear regression model with that of ANN. This study showed the applicability of the ANN model for predicting the performance of activated carbon columns.

Methods: The adsorption module contained 79.8 kg/module of wood-based activated carbon. The gas with 800 ppm-THC of toluene flowed downward from the top at about 5,700 m³/h. The breakthrough point was taken as 200 ppm-THC, the same as VOC emission regulation. The desorption was carried out using 130 m³/h of hot gas flowing upwards with reduced pressure (-150 to -200 mbar) and high heat (170°C). Adsorption and desorption cycles were conducted 6 times using 3 batches of activated carbon modules. Thomas model, Yan model, multiple linear regression model, and ANN model were developed to predict the breakthrough of C_{out}/C_{in} .

Results and Discussion: The Thomas model and the Yan model provided the R^2 values of 0.25 and 0.28, respectively, for predicting the C_{out}/C_{in} of all adsorption module batches and cycles, and the prediction accuracies were low. This could be because these two models do not consider temperature and pressure change operating conditions in the models. Also, the prediction accuracy of C_{out}/C_{in} was low when the initial inlet concentration and flow rate conditions were different for each batch. The multiple linear regression model considers all operating factors in the model, but the prediction accuracy of C_{out}/C_{in} was low as R^2 of 0.45. On the other hand, the ANN model predicted the C_{out}/C_{in} with R^2 higher than 0.97 for all adsorption module batches. In particular, even with the non-ideal data, the ANN model derived a breakthrough of C_{out}/C_{in} close to the experimental value.

Conclusion: The ANN model provided high prediction performance for the breakthrough of C_{out}/C_{in} even under non-ideal operation conditions and was expected to be helpful for actual THC adsorption column operation. The accuracy of the ANN model will be further improved if data are accumulated under various conditions.

Keywords: Volatile organic compounds, Activated carbon, Adsorption, Model, Machine learning

The Korean text of this paper can be translated into multiple languages on the website of <http://jksee.or.kr> through Google Translator.

† Corresponding author

E-mail: sungyunlee@knu.ac.kr

Tel: 054-530-1446 Fax: 054-530-1449

© 2023, Korean Society of Environmental Engineers



This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

연구논문

휘발성 유기화합물(VOCs) 제거를 위한 활성탄 흡착칼럼 성능예측 머신러닝 모델

미타 누르하야티^{1,2} · 홍범의³ · 강호근⁴ · 이승윤^{1,5,*}

¹경북대학교 미래과학기술융합학과

²인도네시아 교육대학교 화학과

³고등기술연구원 바이오자원순환센터

⁴(주)빈텍코리아

⁵경북대학교 환경안전공학과

목적: 본 연구에서는 머신러닝 ANN 알고리즘을 활용하여 파일럿 스케일 VOC 흡착칼럼 성능예측 모델을 개발하였다. 수학적 모델인 Thomas 모델과 Yan 모델, 그리고 다중선형 회귀방정식 모델과의 성능예측 정확성을 비교하고, ANN 모델의 적용가능성을 논의하고자 한다.

방법: 목질계 활성탄을 충전한 모듈(79.8 kg/모듈)을 사용하여 톨루엔 약 800 ppm-THC를 모듈 상부에서 하부방향으로 약 5,700 m³/h로 투입하고, 모듈 출구측 농도가 대기환경 기준 VOC 배출 농도인 200 ppm-THC에 도달시까지 운전하였다. 탈착 운전은 감압(-150 ~ -200 mbar) 및 고열(170°C)을 사용하여 모듈 하부에서 상부 방향으로 hot gas 130 m³/h를 주입하여 복합탈착방식으로 진행하였다. 3개의 활성탄 모듈 batch를 사용하여 흡착 및 탈착 cycle을 6회 진행하였다. VOC 흡착칼럼 실험데이터를 이용하여 파과 C_{out}/C_{in} 농도예측을 위한 Thomas 모델, Yan 모델, 다중선형 회귀방정식 모델, ANN 모델을 개발하였다.

결과 및 토의: Thomas 모델 및 Yan 모델을 활용하여 모든 흡착 모듈 batch와 cycle의 C_{out}/C_{in} 농도비 예측시 R² 값이 각각 0.25와 0.28로 예측 성능이 낮았다. 이 두 모델은 온도, 압력 변화 운전조건을 고려하지 않아, 초기 유입 농도 및 유입 유량이 동일하지 않은 경우 C_{out}/C_{in} 예측 성능에 한계가 있음을 나타낸다. 모든 운전인자를 고려한 다중선형 회귀방정식 모델도 예측 성능 R²이 0.45 수준으로 C_{out}/C_{in} 예측 정확도가 낮았다. 반면 ANN 모델은 모든 흡착 모듈 batch에 대해 C_{out}/C_{in} 농도비 예측을 R² 0.97 이상으로 예측했다. 특히, 비이상적인 데이터 cycle의 경우에도 ANN 모델은 실험값에 근사한 C_{out}/C_{in} 농도비를 도출했다.

결론: ANN 모델은 비이상적인 흡착칼럼 운전 상황에서도 성능예측 가능한 모델로서 실제 THC 흡착 칼럼 운영에 도움이 될 것으로 예상된다. 향후 다양한 조건에서의 데이터가 축적된다면 ANN 모델 정확도가 더욱 향상될 것이다.

주제어: 휘발성 유기화합물, 활성탄, 흡착, 모델링, 머신러닝

1. 서론

휘발성 유기 화합물(volatile organic compounds, VOCs)은 비점이 50~250°C 수준으로 낮아 대기중으로 쉽게 증발되는 유기화합물의 총칭으로, 지방족 탄화수소류, 방향족 탄화수소류, 비균질 탄화수소류(알데히드, 케톤, 알코올 등)를 포함한다.¹⁾ VOC는 암을 유발하고 장기간 노출 시 눈, 피부, 호흡기 등 인체에 악영향을 미친다. 또한 광화학적 반응으로 오존을 발생시키며, 2차 유기입자(secondary organic aerosol, SOA) 미세먼지를 생성하는 전구물질이다.²⁾ 이에 환경부는 국내 대기환경보전법에서 37종의 VOC를 규제 대상물질로 고시하고 배출 저감을 위한 다양한 정책을 수립하고 있다.^{3,4)}

VOC 주요 배출원은 석유정제 및 석유화학제품 제조시설, 저유소, 주유소, 발전시설, 각종 운송수단 및 유기용제를 사용하는 페인트, 폐기물 처리시설 등이며, 대도시에서는 생활밀착형 업종인 인쇄, 세탁, 미용, 음식 및 자동차 수리 도장업체에서 VOC가 주로 배출되고 있다.⁵⁾ 개별 VOC 물질들은 2차 유기에어로졸 형성 잠재력(SOAP, secondary organic aerosol potential)을 통해 SOA 형성 기여도가 추정 가능하며, 배출된 VOC 물질들 중 톨루엔 및 벤젠은 상대적으로 SOAP 비율이 높은 물질로 보고되었다.⁵⁾

VOC 배출 저감 기술에는 열 산화처리, 촉매 산화처리, 광촉매 산화처리, 생물학적처리, 다공성 매질 흡착, 응축 등이 있다.^{6,7)} 이 중 열 산화처리는 가장 간단한 기술로써 VOC를 약

870°C까지 순간적으로 가열하여 제거한다. 하지만 열 산화처리하는 다른 기술들에 비해 에너지 소비가 높은 단점이 있으며, 870°C 이상의 고온에서는 할로겐화 VOC(halogenated VOC)가 2차 분해 후 부산물인 산이 생성되어 후처리 공정이 필요하다.⁸⁾ 반면 다공성 매질을 이용한 흡착 공정은 경제성 및 제거효율, 관리의 용이성에서 장점을 가진다.¹⁾ 대표적인 다공성 매질로는 탄소소재인 활성탄이 널리 활용되며, 이 밖에 탄소 나노튜브, 탄소 섬유, 제올라이트 및 실리카 매질이 활용 가능하다.⁸⁾ 국내의 VOC 배출 사업장에서는 대부분 활성탄 흡착 공정을 VOC 저감 기술로 적용하고 있다.

활성탄 흡착 성능은 분배계수(partition coefficient)와 흡착능(adsorption capacity)을 분석하여 평가한다.⁹⁾ 활성탄의 다공성(porosity), 기공 크기분포, 비표면적, 기능족 등의 특성들이 활성탄 흡착 성능에 영향을 미친다.⁸⁾ 그리고 활성탄 흡착칼럼 운전시 온도, 유입농도, 유량, 습도 조건에 따라 칼럼의 흡착효율이 달라진다. 일반적으로 활성탄 흡착칼럼 온도는 25~35°C로 조절하며, 온도가 높을수록 VOC 제거 효율이 떨어진다.⁸⁾ 유입농도는 활성탄 흡착칼럼의 높이 및 크기 산정에 활용된다. 활성탄 칼럼 체류시간이 길수록 VOC 제거효율이 높아지기 때문에 유입유량이 낮을수록, 흡착칼럼의 높이가 클수록 VOC 제거에 유리하다. 적절한 체류시간은 흡착에 필요 접촉시간과 유사한 것이 바람직하며 산업체 VOC 저감 시설에는 대략 수 분의 흡착 접촉시간이 필요하다. 체류시간은 VOC의 확산 기작과 농도가 영향을 주는데, VOC 확산계수가 낮을수록 필요 접촉시간에 비해서 긴 체류시간이 필요하다.⁸⁾

최적화된 흡착 칼럼의 설계 및 운전조건을 얻기 위해서는 파과곡선과 최대 흡착능이 필요하다. 이는 실험적 접근법이나 수학적 모델링 접근법으로 산정 가능한데, 실험적 방법의 경우 시간 및 비용이 많이 소요되며 모든 운전조건을 실험하기에는 한계가 있다.¹⁰⁾ 수학적 모델링은 이러한 제약이 적어 파과곡선 예측을 위한 수학적 모델개발 연구가 활발히 진행되어 왔다. 널리 활용된 파과곡선 예측 수학적 모델에는 Thomas 모델, Bohart-Admas 모델, Yoon-Nelson 모델, Wang 모델 등이 있다.¹⁰⁻¹²⁾ 비록 많은 파과곡선 예측 모델이 개발되었으나, 모든 흡착 칼럼에 적용할 수 있는 일반화된 모델은 개발되지 않았다. 수학적 예측모델들은 시간에 따른 흡착 칼럼 성능의 변화를 반영하지 못하거나, 실험 조건에 따른 칼럼 성능 차이를 예측하는데 정확도가 떨어지기도 한다.¹⁰⁾

최근 머신러닝 기술은 다양한 분야에서 적용이 되고 있다. 일반적으로 수학적 모델은 이동현상과 관련된 복잡한 방정식의 해를 찾아 예측하는 방식이지만, 머신러닝은 빅데이터를 활용하여 통계적인 방식으로 비교적 빠르고 쉽게 값을 예측한다.¹³⁾ 머신러닝 중에서 널리 사용되고 있는 알고리즘은 인공신경망(artificial neural networks, ANN) 알고리즘으로 사람의 신경망 원리와 구조를 모방한 알고리즘이다. ANN은 입력층(input layer)과 출력층(output layer), 그리고 이 두 층을 연결하

는 은닉층(hidden layer)으로 구성된다. 그리고 데이터 학습을 통해 각층에 포함된 인공뉴런(노드, node) 간의 상관성을 통해 찾아내어 예측모델을 도출한다. ANN은 비선형적인 데이터를 빠르게 해석할 수 있으며, 공정의 복잡한 현상에 대한 깊은 이해 없이도 예측모델 도출이 가능한 강력한 장점이 있다. 따라서 ANN은 멤브레인 공정, 기체 흡착 등의 오염물질 저감공정 뿐 아니라 기체 및 수질 오염물질 모니터링, 열교환기 분석, 에너지원 예측, 비용분석 분야에서 활용되고 있다.¹⁴⁻¹⁶⁾

본 연구에서는 파일럿 규모 VOC 활성탄 흡착 칼럼의 파과곡선 예측모델을 개발하였다. 실험한 파일럿 장치는 운전조건 제어가 어려워 모델링에 활용한 데이터가 불규칙적인 특징이 있었다. VOC 저감 실공정에서도 운전조건이 변하는 상황이 발생할 수 있기 때문에 조건이 일정하지 않은 상황에서도 파과곡선을 정확하게 예측하는 모델이 필요하다. 다양한 수학적 모델 중에서 대표적으로 활용되고 있는 Thomas 모델과 Yan 모델을 활용하여 VOC 파과곡선 예측 모델을 개발하였으며, 다양한 운전인자를 고려하기 위하여 다중선형 모델도 적용하였다. 또한 ANN 알고리즘을 활용하여 활성탄 VOC 흡착칼럼 성능예측 모델을 개발하였다. 각 모델들의 성능예측 정확성을 비교하고, ANN 모델의 적용가능성에 대해 논의하였다.

2. 재료 및 방법

2.1. 활성탄 흡착 모듈 및 실험조건

본 연구에서는 목질계 활성탄을 충전한 모듈(79.8 kg/모듈)을 사용하여 VOC 흡착 실험을 진행하였다. 표면개질하여 비표면적을 개질 전 1,400 m²/g에서 개질 후 2,700 m²/g로 향상시킨 활성탄을 사용하였으며, 사용한 활성탄의 구조적 특징은 Table 1에 나타내었다.

활성탄 모듈은 VOC 흡착 및 탈착 cycle을 반복 운전하였다. 흡착 운전은 톨루엔 약 800 ppm-THC(total hydrocarbon, 총탄화수소 기준)를 모듈 상부에서 하부방향으로 약 5,700 m³/h으로 투입하고, 모듈 출구측 농도가 대기환경 기준 VOC 배출농도인 200 ppm-THC에 도달시까지 운전하였다. 흡착 시 모듈 선속도는 0.1 m/s이며, 유입온도는 약 20°C, 차압은 최대 60 mmAq를 나타내었다. 탈착 운전은 감압(-150~200 mbar) 및 고열(170°C)을 사용하여 모듈 하부에서 상부 방향으로 hot gas 130 m³/h를 주입하여 복합탈착방식으로 진행하였다. 3개의 활성탄 모듈 batch를 흡착 및 탈착 cycle 6회 진행하였으며, 흡착 및 탈착 운전은 각각 약 200 분과 270 분이 소요되었다.

Table 1. Structural properties of the modified activated carbon for VOC adsorption module.

External Area (m ² /g) BET surface area (m ² /g)	Micropore Area (m ² /g)	Total Volume (m ³ /g)
2,700	685 (22.3%)	1.68

흡착 및 탈착시 칼럼의 온도, 유량, 압력, 농도 데이터는 10초마다 저장되었다. 활성탄의 파과시점의 VOC 흡착능(q_b , g/g-AC)은 다음식으로 산정하였다.¹⁷⁾

$$q_b = \frac{M_w}{m V_M} \int_0^{t_b} (C_{in} - C_{out}) Q dt \quad (1)$$

여기서, Q_t 는 시간 t 에서의 유입유량(L·h⁻¹), m 은 활성탄 질량(g), M_w 는 VOC 분자량(g·mol⁻¹), V_M 은 이상기체 몰 당 부피(L·mol⁻¹), C_m 은 유입 농도(ppm), C_{out} 은 유출 농도(ppm), t_b 는 파과시간을 나타낸다.

2.2. 칼럼 흡착 모델

2.2.1. Thomas 모델

Thomas 모델은 활성탄 공극의 외부 및 내부 확산 제한(limitation)이 없는 흡착공정 모델링을 위해 개발되었다. 따라서 입자 간의 물질전달 저항과 외부층(external film) 저항이 매우 작은 조건의 예측에 적합하다.¹⁸⁾ Thomas 모델은 흡착이 2차 가역반응 동역학과 Langmuir 등온흡착을 따르며, 흡착 속도(adsorption rate)는 흡착제와 피흡착제의 표면반응과 미흡착된 흡착제의 용량으로 결정된다고 가정한다.^{10,19)} Thomas 식의 각 상수는 비선형 형태 식을 선형 형태로 변형한 후 실험 데이터 곡선 피팅(curve fitting)으로 얻는다. Thomas 모델의 비선형 및 선형 형태는 다음과 같다.

$$\frac{C_{out}}{C_{in}} = \frac{1}{1 + e^{\left[\frac{k_T}{Q} (q T m - C_{in} V) \right]}} \quad (2)$$

$$\ln\left(\frac{C_{in}}{C_{out}} - 1\right) = \frac{k_T q T m}{Q} - k_T C_{in} t \quad (3)$$

여기서, K_T (L·mg⁻¹·h⁻¹), q_T (mg·g⁻¹)는 Thomas 모델 상수, V 는 유입 가스 총 부피(L), Q 는 유입유량(L·h⁻¹), t 는 시간(h)을 나타낸다.

2.2.2. Yan 모델

Yan 모델은 Thomas 모델의 파과곡선 초기와 후기 기간의 예측 오차를 보완하는 모델이다. Modified dose-response 모델로도 불리며, 최근에는 금속이온 흡착 모델링에 적용되었다.^{11,12,20)} Thomas 모델과 마찬가지로 비선형 Yan 모델식을 선형으로 변형한 후 데이터 곡선 피팅을 통해 Yan 모델 상수를 구하게 된다. Yan 모델의 비선형 및 선형 형태는 다음과 같다.

$$\frac{C_{out}}{C_{in}} = 1 - \frac{1}{1 + \left[\frac{C_{in} Q t}{q_Y m} \right]^{(K_Y C_{in} / Q)}} \quad (4)$$

$$\ln\left(\frac{C_{out}}{C_{in} - C_{out}}\right) = \frac{k_Y C_{in}}{Q} \ln\left(\frac{C_{in} Q}{q_Y m}\right) + \frac{k_Y C_{in}}{Q} \ln(t) \quad (5)$$

여기서, K_Y (L²·mg⁻¹·h⁻¹), q_Y (mg·g⁻¹)는 Yan 모델 상수를 나타낸다.

2.2.3. 다중선형 회귀방정식 모델

활성탄 흡착 모듈의 다양한 운전 인자의 변화는 흡착 파과 곡선 모양에 영향을 미친다. 하지만 Thomas 모델과 Yan 모델 등 기존 수학적 흡착 모델은 모든 운전 인자를 변수로 포함하지 않는다. 따라서 모델에 미포함된 운전인자 변화에 따른 흡착 모듈 성능예측에 한계가 있다. 반면 다중선형 회귀방정식(multiple linear regression, MLR) 모델은 독립변수의 수를 필요한 만큼 증가시킬 수 있는 장점이 있다. C_{out}/C_{in} 농도비를 종속변수 Y로 하고 흡착 모듈 운전인자를 $X_1 \sim X_9$ 의 독립변수로 갖는 일차함수 함수 다중선형 회귀방정식은 다음과 같다.

$$Y = \beta_0 + \beta_1(X_1) + \beta_2(X_2) + \beta_3(X_3) + \beta_4(X_4) + \beta_5(X_5) + \beta_6(X_6) + \beta_7(X_7) + \beta_8(X_8) \quad (6)$$

여기서, X_1 은 cycle 번, X_2 는 시간(second), X_3 은 흡착 칼럼 하부 온도(°C), X_4 는 흡착 칼럼 상부 온도(°C), X_5 는 흡착 칼럼 하부 압력(mmAq), X_6 은 흡착 칼럼 상부 압력(mmAq), X_7 은 유입 농도(ppm), X_8 은 유입 가스 유량(m³/h), β_0 는 절편 값, $\beta_1 \sim \beta_9$ 는 회귀방정식 각 독립 변수의 선형회귀 상수(regression coefficient)를 나타낸다.

모든 batch와 cycle 데이터를 무작위로 나누어 70% 데이터 세트는 선형회귀 상수를 구하기 위해 train 세트로 사용하였으며, 30% 데이터 세트는 검증을 위한 test 세트로 사용하였다. 다중선형 회귀방정식 모델은 Matlab으로 수행하였다.

2.2.4. ANN 모델

C_{out}/C_{in} 농도비 파과곡선 예측을 위해 머신러닝 ANN 알고리즘을 적용했다. ANN 모델은 다층 전방향 신경망(multi-layered feedforward neural network)을 사용했으며, 입력층(input layer)과 출력층(output layer) 그리고 이 두 층을 연결하는 은닉층(hidden layer)로 구성된다.²¹⁾ 다중선형 회귀방정식과 동일한 9개의 운전인자 독립변수를 입력층에 사용했으며, 8개 뉴런을 포함하는 1개의 은닉층과 1개의 출력층을 사용하였다. 학습 알고리즘은 오류 역전파 알고리즘(error backpropagation algorithm)을 사용하였으며, 탄젠트시그모디(tansig) 함수를 활성화함수(activation function)로 사용하였다.²²⁾

$$Y = f\left(\sum_{i=1}^n w_i x_i + b\right) \quad (7)$$

여기서, w_i 는 연결강도 wight, x_i 는 입력값, b 는 출력 뉴런

Table 2. Average and range (in parenthesis) of operating condition and adsorption capacity for VOC adsorption columns. Each adsorption column batch was operated in 6 cycles.

Batch	Inlet Conc. (ppm)	Flow rate (m ³ /h)	Top Temp. (°C)	Bottom Temp. (°C)	Top pressure (mmAq)	Bottom pressure (mmAq)	Adsorption capacity at C _{out} 200 ppm (g/g-AC)
1	520.2 (7-1,000)	5,669 (14-7,119)	16.4 (7.2-34.3)	17.3 (9-36.7)	67.6 (2-114)	26.1 (0-100)	0.43 (0.41-0.46)
2	660.4 (10-950)	5,700 (9-6,530)	19.3 (10.2-29.5)	20.2 (11.3-31.1)	70.4 (5-86)	16.2 (0-33)	0.43 (0.40-0.48)
3	610.1 (3-995)	5685 (0-6,660)	17.4 (10.5-25.8)	17.8 (9.8-26.4)	64.6 (0-114)	17.4 (0-100)	0.42 (0.40-0.44)

절편, f 는 활성함수 Y 는 뉴런 출력 값을 나타낸다.
 ANN 모델링은 실측 C_{out}/C_{in} 농도비에 가까운 값을 예측하

기 위해 학습(training)을 통해 은닉층 뉴런의 weight 값을 변
 화시키는 과정을 거친다. MLR 모델과 동일하게 모든 batch와

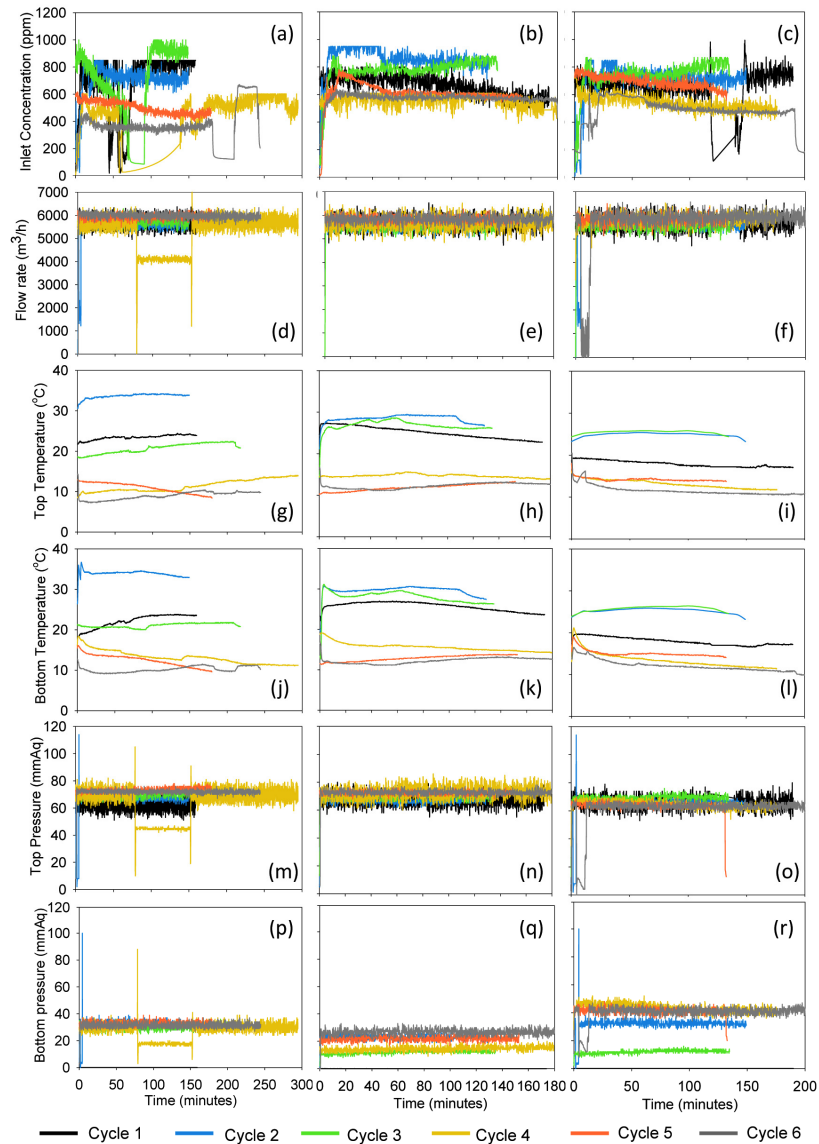


Fig. 1. Operation condition of 6 cycle adsorption experiments of 3 batch VOC adsorption columns. Adsorption column batch 1: (a), (d), (g), (j), (m), (p). Adsorption column batch 2: (b), (e), (h), (k), (n), (q). Adsorption column batch 3: (c), (f), (i), (l), (o), (r). Each panel contains operation condition of 6 cycle corresponding to the batch column. Operation condition includes inlet concentration, flow rate, top and bottom temperature of the column, top and bottom pressure of the column.

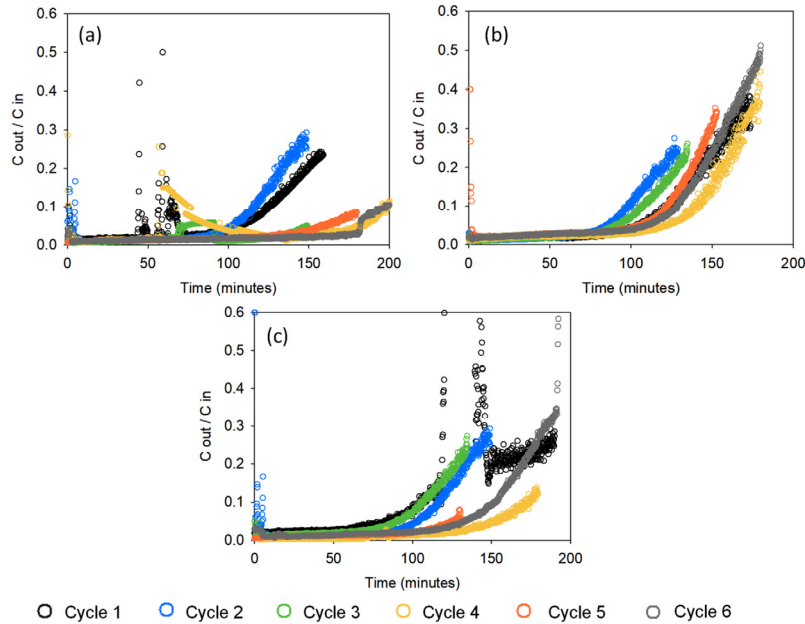


Fig. 2. Breakthrough curve for 6 cycle adsorption experiments of VOC adsorption columns. (a) batch 1 column, (b) batch 2 column, (c) batch 3 column.

cycle 데이터의 70%를 ANN 모델 학습에 사용하였고, 30%를 test 세트에 사용하였다. ANN 모델 도출은 Matlab으로 수행하였다.

2.3. 모델의 예측성능 분석

개발된 Thomas, Yan, MLR, ANN 모델의 예측성능은 R²와 RMSE 값으로 비교하였다.²³⁾

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n \left(\frac{C_{out}}{C_{in}} \right)_{i,exp} - \left(\frac{C_{out}}{C_{in}} \right)_{exp,mean} \right)^2 - \sum_{i=1}^n \left(\left(\frac{C_{out}}{C_{in}} \right)_{i,exp} - \left(\frac{C_{out}}{C_{in}} \right)_{i,pred} \right)^2}{n} \quad (8)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \left(\left(\frac{C_{out}}{C_{in}} \right)_{exp} - \left(\frac{C_{out}}{C_{in}} \right)_{pred} \right)^2}{n}} \quad (9)$$

3. 결과 및 고찰

3.1. VOC 흡착 파과곡선 분석

활성탄 흡착 파과곡선 분석은 흡착제의 동적 흡착특성, 흡착능 등 흡착 시스템 설계에 중요한 정보를 제공한다.²⁴⁾ Table 2 및 Fig. 1은 흡착 실험 동안 각 흡착 모듈 batch의 유입 농도, 유량, 칼럼 상부 및 하부 온도, 칼럼 상부 및 하부 압력 변화 범위와 흡착능을 나타낸다. 모든 실험에서 동일한 운전조건을 유지하고자 하였으나 모듈 batch 및 cycle별로 조건이 다소 차이가 있었다. 테스트한 3개의 모듈 batch는 160~200분간 운전했을 때 파과 농도가 관찰되었으며, 파과시점의 흡착능은 평균 0.42 g/g-AC로 나타났다. 이전 연구에 따르면 상업용 활

성탄 흡착제의 톨루엔 최대 흡착능은 0.4 g/g-AC 수준이다.²⁵⁾ 최대 흡착능은 흡착 binding site가 완전히 소진되었을 때(유출 농도가 유입농도가 동일한 시점) 측정한다. 하지만 본 연구에서는 배출 농도가 VOC 배출 농도인 200 ppm에 도달했을 때 실험을 종료한 것을 감안하면 본 연구에 사용한 개량 활성탄의 흡착능은 우수하다고 판단된다.

Fig. 2는 각각의 흡착 모듈 batch에서 실험한 6 cycle의 유입 농도와 유출 농도의 비 (C_{out}/C_{in}) 파과곡선을 나타낸다. 이상적인 파과곡선은 S자 형태의 대칭된 모양이지만¹⁰⁾ 본 연구에서는 흡착 칼럼을 VOC 배출 농도까지 운전하여 파과곡선의 초기단계만 관찰되었다. 시간에 따라 불규칙적으로 변하는 운전조건 영향으로 인해 일부 cycle의 파과곡선(batch 1의 cycle 1, cycle 4 및 batch 3 cycle 1 등)이 비정상적인 파과곡선 형태를 보였다. 반면, 시간에 따른 운전조건변화가 적었던 batch 2 모듈은 다른 모듈에 비해 상대적으로 안정적인 파과곡선을 나타내었다.

파과시간은 유입 농도, 유입 유량, 흡착 칼럼의 길이 등에 영향을 받는다.²⁰⁾ 유입 농도가 높을수록 피흡착제가 흡착 binding site를 빠르게 채우기 때문에 파과시간이 짧아지며²⁴⁾, 흡착 칼럼의 길이가 길어지면 흡착제의 양이 증가하여 파과시간이 길어진다.¹¹⁾ 그리고 유입 유량이 증가할수록 피흡착제가 활성탄의 기공으로 확산되는 시간을 제한하여 파과시간이 짧아진다.²⁶⁾ 흡착 운전중의 batch 2 모듈의 유입 농도를 나타낸 Fig. 1(b)를 보면, cycle 별로 초기 유입 농도가 580 ~ 900 ppm로 다르다. Batch 2의 각 cycle 유입 농도는 cycle 2 > cycle 3 > cycle 1 > cycle 5 ≈ cycle 6 ≈ cycle 4 순으로 농도가 높았으며 초기유입 농도는 흡착운전동안 유지되었다. 이러한

Table 3. Thomas model coefficients and R^2 of adsorption breakthrough curve prediction for other data sets.

Data for coefficients		Operation condition			Thomas coefficients		R^2 of C_{out}/C_{in} Prediction		
Experiment ID	Data time range for coefficient (min)	Temp. (°C)	Flow rate (m ³ /h)	Inlet Conc. (ppm)	K_T (Lmg ⁻¹ h ⁻¹)	q_T (mg/g)	batch 2- cycle 4 or batch 2- cycle 6	batch 2, all cycle	all batch, all cycle
batch 2- cycle 4	0 - 180	12 - 16	5184 - 6386	218 - 649	2.04 x 10 ⁻³	1.67 x 10 ⁵	0.5283	0.6015	0.2370
	100 - 160	12 - 14	5184 - 6296	533 - 617	2.02 x 10 ⁻³	1.70 x 10 ⁵	0.5265	0.6010	0.2353
batch 2- cycle 6	0 - 180	14 - 19	4838 - 6521	391 - 610	2.31 x 10 ⁻³	1.49 x 10 ⁵	0.7272	0.6072	0.2530
	100 - 160	14 - 15	4865 - 6521	391 - 610	4.58 x 10 ⁻³	1.24 x 10 ⁵	0.7705	0.5811	0.2543

유입 농도 차이는 batch 2의 cycle별 파과시간 차이에 영향을 미친 것으로 판단된다. 즉, cycle의 초기 유입 농도가 높을 수록 파과시간이 짧은 경향을 나타내었다(Fig. 1(b)). 하지만 batch 2의 cycle 6의 경우, 유입 농도가 cycle 1에 비해 낮음에도 불구하고 파과시간이 cycle 1과 유사하였는데, 이는 cycle 6의 유입유량이 cycle 1에 비해 높기 때문일 수 있다(Fig. 2(e)).

흡착 및 탈착 운전 6 cycle 동안 모든 batch 모듈에서 흡착능 저하 및 파과시간 감소 경향이 관찰되지 않았다. 파일럿 규모 실험의 특성상 모듈 및 cycle 별 운전조건이 다소 차이가 있었으며, 정확한 파과 농도 예측모델 개발을 위해서는 Fig. 1에 나타낸 다양한 운전요소가 모델에 반영되어야 한다.

3.2. 모델링 성능 비교

3.2.1. Thomas 모델 시뮬레이션

Thomas 모델을 이용하여 C_{out}/C_{in} 를 예측하기 위해서는 먼저 모델 상수인 K_T 와 q_T 도출이 필요하다. Table 3은 흡착 실험동안 유입 농도 및 유량이 가장 안정적이었던 batch

2-cycle 4와 cycle 6의 흡착실험 구간(0~180 min)과 실험조건이 특히 안정적인 구간(100~160 min) 데이터를 활용하여 식 (3)으로 계산한 Thomas 모델 상수를 나타낸다. 그리고 계산된 Thomas 모델 상수를 i) batch 2의 타 cycle(cycle 4 데이터로 얻은 모델 상수는 cycle 6에 cycle 6 데이터로 얻은 모델 상수는 cycle 4에 상호적용), ii) batch 2의 모든 cycle, iii) 모든 batch의 모든 cycle 데이터 세트에 적용하여 Thomas 모델 C_{out}/C_{in} 예측 성능을 R^2 값으로 나타내었다. Table 3에 나타낸 바와 같이, K_T 와 q_T 값이 cycle 및 데이터 구간 별로 다소 차이가 있었으며 이는 동일한 흡착 모듈 batch 혹은 cycle에서도 운전조건 변화가 K_T 와 q_T 값에 영향을 미친다는 것을 나타낸다.

계산된 Thomas 모델 상수를 활용하여 다른 데이터 세트의 C_{out}/C_{in} 농도비 예측 성능 비교 결과, batch 2-cycle 6의 100~160 min에서 얻은 모델 상수가 상대적으로 높은 R^2 값을 나타내었다. 예를 들어, batch 2-cycle 4의 C_{out}/C_{in} 농도비 예측에 적용시 R^2 값이 0.73이었다. 그러나 동일 모델 상수를 batch 2의 모든 cycle(batch 2-all cycle)과 모든 흡착 모듈 batch와

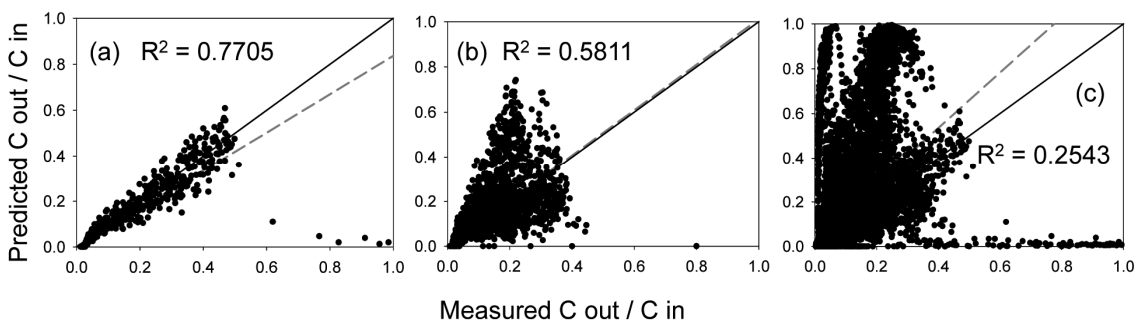


Fig. 3. Predicted C_{out}/C_{in} using Thomas model with coefficient derived from 100~160 min of batch 2-cycle 6 versus measured C_{out}/C_{in} . Prediction of C_{out}/C_{in} for (a) batch 2-cycle 4, (b) batch 2-all cycle, and (c) all batch-all cycle.

Table 4. Yan model coefficients and R^2 of adsorption breakthrough curve prediction for other data sets.

Data for coefficients		Operation condition			Yan coefficients		R^2 of C_{out}/C_{in} Prediction		
Experiment ID	Data time range for coefficient (min)	Temp. (°C)	Flow rate (m ³ /h)	Inlet Conc. (ppm)	KY (L ² mg ⁻¹ h ⁻¹)	q_Y (mg/g)	batch 2- cycle 4 or batch 2- cycle 6	batch 2, all cycle	all batch, all cycle
batch 2- cycle 4	0 - 180	12 - 16	5184 - 6386	218 - 649	9.47 x 10 ³	8.27 x 10 ⁵	0.5837	0.5507	0.1640
	100 - 160	12 - 14	5184 - 6296	533 - 617	5.96 x 10 ⁴	1.22 x 10 ⁵	0.6804	0.6849	0.3070
batch 2- cycle 6	0 - 180	14 - 19	4838 - 6521	391 - 610	8.98 x 10 ³	1.04 x 10 ⁶	0.6251	0.5321	0.1440
	100 - 160	14 - 15	4865 - 6521	391 - 610	5.68 x 10 ⁴	1.31 x 10 ⁵	0.8146	0.6845	0.2865

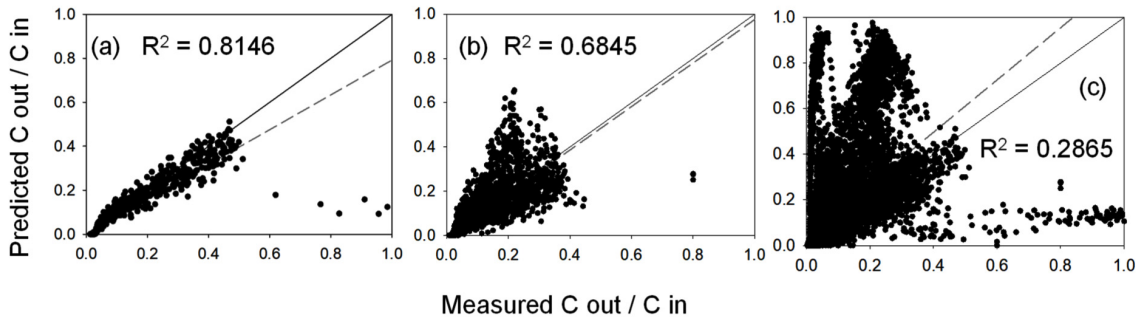


Fig. 4. Predicted C_{out}/C_{in} using Yan model with coefficient derived from 100~160 min of batch 2-cycle 6 versus measured C_{out}/C_{in} . Prediction of C_{out}/C_{in} for (a) batch 2-cycle 4, (b) batch 2-all cycle, and (c) all batch-all cycle.

cycle(all batch-all cycle)의 C_{out}/C_{in} 농도비 예측 적용시 R^2 값이 각각 0.58와 0.25으로 예측 성능이 크게 낮아졌다. Fig. 3은 batch 2-cycle 6의 100~160 min에서 얻은 Thomas 모델 상수 값을 활용하여 타 cycle 및 batch의 C_{out}/C_{in} 예측 성능을 그래프로 보여준다. Fig. 3의 결과는 Thomas 모델이 온도, 압력 변화 운전조건을 고려하지 않아, 초기 유입 농도 및 유입 유량이 다른 경우에는 동일한 모델 상수를 적용하여 C_{out}/C_{in} 예측 성능을 하기에는 한계가 있음을 나타낸다.

3.2.2. Yan 모델 시뮬레이션

3.2.1과 동일하게 비교적 실험조건이 안정적이었던 batch 2-cycle 4 및 batch 2-cycle 6 데이터 세트를 활용하여 Yan 모델 상수를 도출하였다. 그리고 계산된 모델 상수로 다른 데이터 세트의 C_{out}/C_{in} 농도비 예측하고 예측 성능을 R^2 로 Table 4에 나타내었다.

Thomas 모델결과와 유사하게 흡착모듈 batch 2-cycle 6의 100-160 min 데이터로 얻은 Yan 모델 상수가 가장 높은 R^2 값을 보였으며, 전반적으로 예측 성능 R^2 값은 Thomas 모델보다 다소 높은 값을 나타내었다. batch 2-cycle 6의 100~160 min에서 얻은 Yan 모델 상수 값을 활용하여 타 cycle 및 batch의 C_{out}/C_{in} 예측 성능을 그래프로 Fig. 4에 나타내었다. Fig. 4에서 알 수 있듯이 Yan 모델도 실험조건이 다소 차이가 있는

Table 5. Multiple linear regression coefficients for adsorption breakthrough curve prediction.

Variable	Coefficient	Value
Intercept	β_0	-0.0677
cycle	β_1	0.0055
Time	β_2	1.64×10^{-5}
Bottom temperature	β_3	-0.0036
Top temperature	β_4	0.069
Bottom pressure	β_5	-0.0011
Top pressure	β_6	1.57×10^{-4}
input concentration	β_7	-9.77×10^{-5}
Flow rate	β_8	7.63×10^{-6}

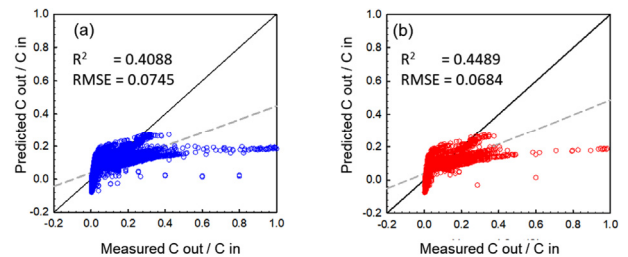


Fig. 5. Predicted C_{out}/C_{in} using multiple linear regression model versus measured C_{out}/C_{in} . Prediction of C_{out}/C_{in} for (a) train data set and (b) test data set for all batch-all cycle.

다른 batch의 실험결과들을 예측하기에는 한계가 있는 것으로 판단된다. Thomas와 Yan 모델에서는 유입 농도와 유량이 시간에 따라 변동이 있는 흡착 시스템의 성능을 예측하기 어렵다고 판단되며, 압력, 온도 등의 변수를 고려하지 않기 때문에 파과곡선 예측 정확성이 낮다.

3.2.3. 다중선형 회귀방정식 모델 시뮬레이션

Table 5는 모든 batch와 cycle 데이터 중 무작위로 선별된 70%의 데이터를 사용하여 곡선 피팅으로 산정한 다중선형 회귀방정식의 모델 상수를 나타내며, Fig. 5는 다중선형 회귀방정식 모델을 사용하여 train 데이터와 test 데이터에 대한 C_{out}/C_{in} 대한 예측 성능을 보여준다. 두 데이터 set의 R^2 및 RMSE 값이 유사하여 과적합(overfitting)의 문제는 없으므로 판단된다. Thomas 및 Yan 모델에서는 고려하지 못한 운전 인자인 batch, cycle, 온도 및 압력 등이 반영되어 전체 batch 및 cycle을 대상으로 한 예측 C_{out}/C_{in} 예측 성능 R^2 이 0.45로 다소 향상되기 하였으나, 다중선형 회귀방정식 모델도 정확한 C_{out}/C_{in} 예측을 하지 못하였다(Fig. 5). 이는 적용된 각 운전 인자와 C_{out}/C_{in} 의 비선형적 상관성과 각 운전 인자 간의 복합적인 영향이 선형회귀 모델에서는 고려되지 않았기 때문으로 예상된다.

3.2.3. ANN 모델 시뮬레이션

ANN 모델은 다양한 인자 간의 복잡한 상관관계를 도출하

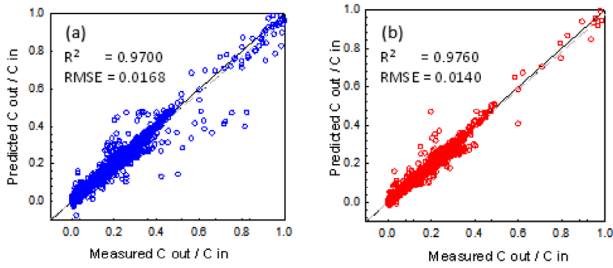


Fig. 6. Predicted C_{out}/C_{in} using ANN model versus measured C_{out}/C_{in} . Prediction of C_{out}/C_{in} for (a) train data set and (b) test data set for all batch-all cycle.

여 독립변수와 종속변수의 비선형적 상관관계를 반영한 예측 모델 개발이 가능하다.²²⁾ 모든 batch와 cycle 데이터 중 무작위로 선별된 70%의 train 데이터를 사용하여 C_{out}/C_{in} 농도비 파과곡선 예측 ANN 모델을 도출하였으며, Fig.5는 train 데이터와 test 데이터에 대한 파과곡선 ANN 모델 예측 성능을 보여준다. 운전조건이 다른 모든 batch의 데이터를 활용하였음에도 실측 C_{out}/C_{in} 농도비와 예측된 C_{out}/C_{in} 농도비의 R^2 값이 train 및 test 데이터 세트 모두 0.97이상의 높은 상관성을 나타내었다. 그리고 train 및 test 데이터의 RMSE 값이 유사하여 모델이 과적합 되지 않았다. 다중선형 회귀방정식 모델과 달리 ANN 모델에서는 C_{out}/C_{in} 농도비와 운전인자의 비선형적 상관성이 고려되어 우수한 예측성능을 보인 것으로 판단된다.

3.2.3. 모델간 VOC 흡착 파과곡선 예측결과 비교

Thomas 모델과 Yan 모델, MLR 모델 및 ANN 모델을 활용한 C_{out}/C_{in} 농도비 파과곡선을 실험값과 예측 모델값을 Fig.

7에 비교하여 나타내었다. Fig.7(a)~(c)는 3개의 batch 흡착실험에서 상대적으로 이상적인 파과곡선 형태를 보인 각 batch의 cycle 2에 대한 모델 예측을 나타내며, Fig.7(d)~(f)는 각 batch의 비이상적인 cycle을 예측한 대표적인 모델결과를 나타낸다 ((d) batch 1-cycle3, (e) batch 2-cycle 6, (f) batch 3-cycle 1 데이터).

Fig.7(a)~(c)에 나타내었듯이, Thomas 모델과 Yan 모델은 실험초기(약 80분 이전)에는 실험값과 유사한 C_{out}/C_{in} 농도비를 예측하였지만 약 80분 이후에는 실험값과 차이가 크고 변동이 큰 결과를 나타내었다. 다중선형 회귀방정식 모델의 R^2 이 약 0.4로 수학적 흡착모델(Thomas 및 Yan)의 R^2 0.2 수준보다는 높았지만 S 형태의 파과곡선 형태를 나타내지 않고 일정하게 증가하는 형태를 보여 적합하지 않은 모델로 판단된다.

흡착실험이 안정적으로 진행되지 않았던 조건에서의 모델 예측결과를 보면(Fig. 7(d)~(f)), 수학적 흡착모델들은 변화된 실험조건 반영하지 못하고 각 모델의 기본형태내에서 예측결과가 도출하였다. 특히, Fig.7(d)와 7(f) 경우처럼 실험 중 불안정한 유입 농도(Fig.2)로 인해 다른 cycle과 달리 실제 실험에서는 파과되지 않았음에도 불구하고 100 min 이후에 실험치보다 매우 높은 C_{out}/C_{in} 농도비로 예측했다.

반면, ANN 모델은 흡착실험 후반에서는 예측치가 실험값과 근소한 차이를 나타내기는 하였지만, 모든 batch에서 전반적으로 상당히 실험치와 매우 유사하게 C_{out}/C_{in} 농도비를 예측했다. 특히, 비이상적인 cycle의 경우에도 ANN 모델은 모든 batch의 실험값에 근사한 C_{out}/C_{in} 농도비를 도출하였다 (Fig. 7(d)~(f)).

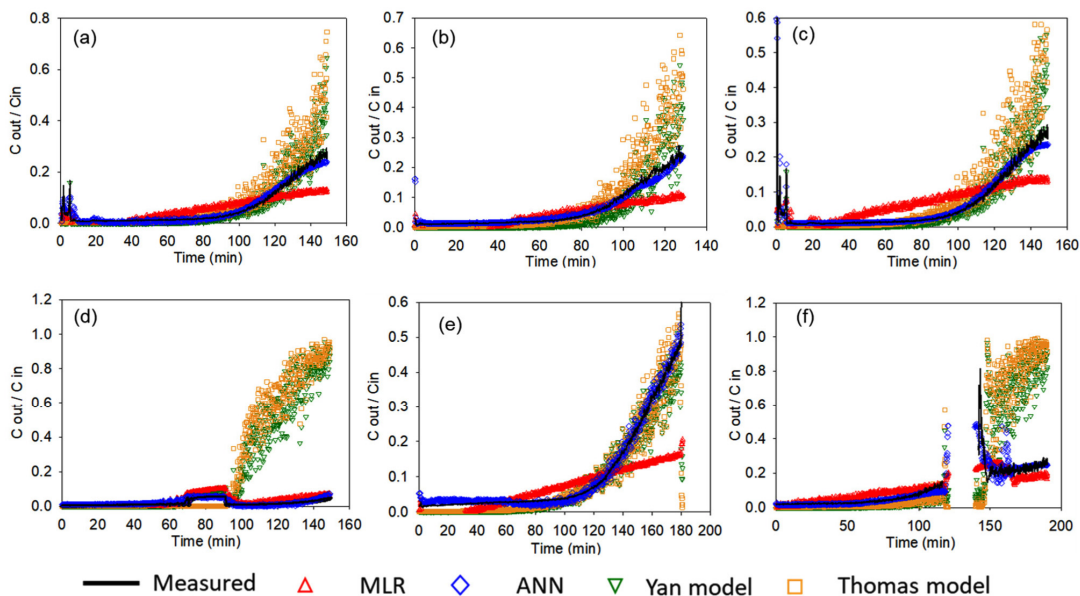


Fig. 7. Breakthrough curve of batch 1, 2, 3 under ideal condition (a, b, c), and under abnormal condition (d, e, f) based on the real measurement, MLR, ANN, Yan model, and Thomas model.

Table 6. Varied operation conditions for ANN model to predict breakthrough curve of the adsorption column. When one of the parameters was changed, the other parameters remained the same with the batch 2- cycle 2 condition.

Operation parameter		-50%	- 25%	Batch 2-cycle 2	+25%	+50%
Inlet concentration (ppm)		135 - 475	203 - 712	270 - 950	338 - 1188	406 - 1425
Flow rate (m ³ /h)		2511 - 2961	3766 - 4441	5022 - 5922	6278 - 7403	7533 - 8883
Column temperature (°C)	Bottom	9.70 - 15.35	14.55 - 23.03	19.4 - 30.7	29.13 - 36.88	29.1 - 46.05
	Up	11.65 - 14.75	17.48 - 22.13	23.3 - 29.5	24.25 - 38.38	34.95 - 44.25

실험실 규모로 진행된 톨루엔 및 사염화 탄소(carbon tetrachloride)의 metal organic framework(MOF) 흡착 파과곡선을 예측한 기존 연구에서는 Thomas 모델과 Yan 모델 모두 R² 값이 0.99 이상으로 높게 나타났다.²⁷⁾ 하지만 파일럿 스케일에서 진행된 증급속 흡착 실험에서는 Thomas 모델이 흡착 파과곡선 예측 R²가 다소 낮은 값을 보였으며, 원인으로 정교하게 제어되지 않은 파일럿 운전 을 예상하였다.²⁸⁾ 다양한 물질들이 공존하고 실험조건 조절이 어려운 파일럿 실험에서는 수학적 모델을 적용한 연구사례를 찾기가 어려운 것도 이러한 영향일 수 있다. 반면 머신러닝 기반의 모델은 다공성 탄소 흡착제를 활용한 아세톤 관련 다수의 문헌 데이터에 대해서도 예측 R² 값을 0.99까지 예측하기도 했다.²⁹⁾ 아세톤 흡착 데이터들이 실험실규모인 것을 감안하더라도 각기 다른 탄소 흡착제를 사용한 데이터들로 높은 흡착 예측이 가능하다는 것은 머신러닝 모델의 높은 흡착 성능예측 활용도를 나타낸다. 마찬가지로 본 연구 결과는 ANN 모델이 비이상적인 흡착칼럼 운전 상황에서도 높은 정확도로 결과 예측이 가능함을 보였으며, ANN 모델이 THC 흡착 칼럼 현장운영에 도움이 될 것으로 예상된다.

3.3. ANN 모델을 이용한 VOC 흡착 성능 예측활용

Fig.8은 변화된 운전조건을 인위적으로 가정하여 ANN 모델로 예측한 흡착 파과곡선 결과를 나타낸다. 유입유량, 유입농도 및 칼럼온도를 batch 2-cycle 2의 실험조건 대비 각각 -50% ~ 50%까지 25% 단계별로 운전조건을 변화시켰다 (Table 6). 일반적으로 유입 농도가 높으면 상대적으로 흡착칼럼으로의 확산 속도가 빨라서 흡착포화가 더 빨리 진행된다.³⁰⁾ 유입 농도 변화에 따른 유출 THC 농도를 예측한 Fig.8(d)에서도 예상한 경향이 나타났다. 즉, batch 2-cycle 2의 실험조건 대비 50%가 높은 유입농도 조건에서 유출농도가 가장 빨리 200 ppm-THC에 도달하였다. 그런데 batch 2-cycle 2의 실험조건 대비 유입농도가 -25% 및 -50% 낮은 경우에는 200 ppm 도달시간이 지연되었으나, 그 차이가 크지 않아 낮은 농도가 유출농도 감소에 끼치는 영향이 낮은 것으로 예측되었다.

유량 변화의 경우, batch 2-cycle 2의 실험조건 대비 유량을 -50% ~ 50% 변화를 가정한 조건에서는 유량에 관계없이 유출농도가 유사한 것으로 예측되었다(Fig.8(b) 및 8(e)). 반면, 흡착칼럼의 온도는 값이 높을수록 흡착제 거 효율이 급격히 낮아지는 것으로 예측되었다(Fig.8(c) 및 (f)). 따라서 VOC

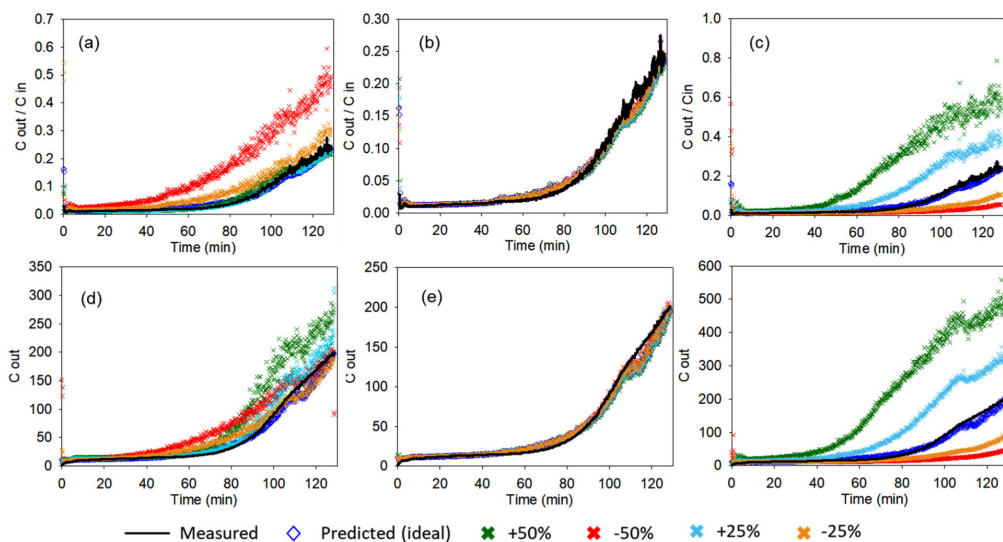


Fig. 8. Application of ANN model to expect the breakthrough curve under modified operation condition compared to batch 2-cycle2 condition. (a)-(C) show predicted C_{out}/C_{in} and (d)-(f) are predicted C_{out} under changed inlet concentration ((a) and (d)), flow rate ((b) and (e)), and column temperature ((c) and (f)) conditions. The detailed changed conditions are presented in Table 6.

제거효율을 향상시키기 위해서는 유입유량을 낮게 제어하는 것 보다는 흡착칼럼 온도를 낮게 유지하는 것이 효과적인 것으로 예상된다.

4. 결 론

본 연구에서는 파일럿 규모의 VOC 제거 활성탄 흡착 칼럼의 성능 예측모델을 개발하였다. 흡착모델로 널리 활용된 수학적 흡착 모델인 Thomas 모델과 Yan 모델 그리고 다중 선형 회귀 분석, ANN 모델링 방법이 적용되었으며, 각각의 모델 성능을 비교 분석하였다. 분석에 활용된 데이터는 파일럿 규모의 실험계약으로 운전조건이 정교하게 조절되지 않아 흡착 실험동안 유량, 온도, 압력, 유입 농도 등의 운전조건이 일정하지 못한 특징이 있었다. 다양한 운전인자를 모델식에 포함하지 못한 Thomas 모델과 Yan 모델은 성능 예측 정확도가 낮았다. 다중회귀 분석 모델은 모든 운전인자를 모델 변수로 포함할 수는 있었으나 각 운전인자가 유출농도에 선형적으로 영향을 주어야하는 한계점으로 예측 모델의 성능이 낮았다. 이들 모델에 비해 ANN 모델은 R² 값이 0.97 이상으로 우수한 예측력을 나타내었다. 운전조건이 변화하는 조건에서도 높은 정확도를 나타낸 결과는 ANN 모델이 VOC 제거 활성탄 흡착 칼럼의 성능예측에 활용 가능성이 높음을 나타낸다. 또한 도출한 ANN 모델을 이용하여 인위적으로 변화된 운전 데이터로 유입농도, 유입유량, 칼럼 온도가 유출 농도에 미치는 영향 분석에 활용 가능함을 제시하였다. 향후 다양한 조건에서의 실험 데이터가 축적된다면 ANN모델의 VOC 흡착 성능예측 정확성 검증이 가능할 것이며, ANN 모델 정확도 향상이 가능할 것으로 기대된다.

Acknowledgement

본 연구는 환경부 “사업장 미세먼지 지능형 최적 저감 관리기 술개발사업”(과제번호: RE202201869)”과 2021년도 정부(교육부) 재원의 한국연구재단 기초연구사업(과제번호: 2020R111A3069197)의 지원을 받아 수행된 연구입니다.

References

1. M. Jurkiewicz, M. Musik, R. Pelech, Competitive adsorption of a binary VOC mixture from the gas phase onto activated carbon modified with malic acid, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 61, 11947-11952(2022).
2. W. Wei, S. Chen, Y. Wang, L. Cheng, X. Wang, S. Cheng, The impacts of VOCs on PM2.5 increasing via their chemical losses estimates: A case study in a typical industrial city of China, *Atmos. Environ.*, 273, 118978(2022).
3. L. Sang-Jin, L. Byeong-Kyu, K. Seong-Joon, K. Dai-Gon, L. Greem, K. Hyun-Jung, K. Hyo-Seon, P. Dae-Yong, C.

- Sung-Deuk, Reduction Efficiency of Secondary Organic Aerosols by Emission Reduction Scenarios of Volatile Organic Compounds in Ulsan, *Journal of Korean Society for Atmospheric Environment*, 38, 919-932(2022).
4. C. Seongwoo, P. Seungwoo, C. Youngwook, L. Seoi, Y. Eunuchul, The Characteristics of Air Pollutants Distribution Around Industrial Complexes Using Real-Time Mobile Atmospheric Measurement System, *Journal of Korean Society of Environmental Engineers*, 43, 476-489(2021).
5. C. Jeong-Seok, C. Jong-Seong, K. Min-Young, J. Jun-Min, L. Tae-Jung, J. Young-Min, Inventory of VOCs Including Ozone Precursors Emitted from Residential Workplaces and Evaluation of Contribution to Ozone Formation, *Journal of Korean Society for Atmospheric Environment*, 38, 175-187(2022).
6. J. Alcañiz-Monge, M. Pérez-Cadenas, J.P. Marco-Lozar, Removal of harmful volatile organic compounds on activated carbon fibres prepared by steam or carbon dioxide activation, *Adsorption Science & Technology*, 30, 473-482(2012).
7. M.J. Lashaki, M. Fayaz, H. Wang, Z. Hashisho, J.H. Philips, J.E. Anderson, M. Nichols, Effect of adsorption and regeneration temperature on irreversible adsorption of organic vapors on beaded activated carbon, *Environ. Sci. Technol.*, 46, 4083-4090(2012).
8. W.K. Pui, R. Yusoff, M.K. Aroua, A review on activated carbon adsorption for volatile organic compounds (VOCs), 35, 649-668(2019).
9. Y. Zhao, M. Zhang, C. Yang, R. Xiang, X. Yang, L. Cui, Performance evaluation and prediction of activated carbon for VOCs via experiments and LFER methods, *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 116, 385-392(2022).
10. Z. Xu, J.-g. Cai, B.-c. Pan, Mathematically modeling fixed-bed adsorption in aqueous systems, *Journal of Zhejiang University SCIENCE A*, 14, 155-176(2013).
11. C. Araneda, C. Basualto, J. Sapag, C. Tapia, D. Cotorás, F. Valenzuela, Uptake of copper (II) ions from acidic aqueous solutions using a continuous column packed with microcapsules containing a β -hydroxyoximic compound, *Chem. Eng. Res. Des.*, 89, 2761-2769(2011).
12. G. Yan, T. Viraraghavan, M. Chen, A new model for heavy metal removal in a biosorption column, *Adsorption Science & Technology*, 19, 25-43(2001).
13. H. Mashhadimoslem, A. Ghaemi, Machine learning analysis and prediction of N₂, N₂O, and O₂ adsorption on activated carbon and carbon molecular sieve, *Environmental Science and Pollution Research*, 30, 4166-4186(2023).
14. R.A. Aftab, S. Zaidi, M. Danish, K.B. Ansari, M. Danish, Novel machine learning (ML) models for predicting the performance of multi-metal binding green adsorbent for the removal of Cd (II), Cu (II), Pb (II) and Zn (II) ions, *Environmental Advances*, 9, 100256(2022).
15. L. Sang-Min, K. Il-Kyu, A comparative study on the application of boosting algorithm for Chl-a estimation in the downstream of Nakdong River, *Journal of Korean Society of Environmental Engineers*, 43, 66-78(2021).
16. P. Jungsu, Comparison of automated machine learning model

- performance for predicting Chlorophyll-a concentration according to measurement frequency of input data, *Journal of Korean Society of Environmental Engineers*, 45, 201-209(2023).
17. R.R. Gil, B. Ruiz, M.S. Lozano, M.J. Martín, E. Fuente, VOCs removal by adsorption onto activated carbons from biocollagenic wastes of vegetable tanning, *Chem. Eng. J.*, 245, 80-88(2014).
 18. B.S. Chittoo, C. Sutherland, Column breakthrough studies for the removal and recovery of phosphate by lime-iron sludge: Modeling and optimization using artificial neural network and adaptive neuro-fuzzy inference system, *Chin. J. Chem. Eng.*, 28, 1847-1859(2020).
 19. R. Han, Y. Wang, X. Zhao, Y. Wang, F. Xie, J. Cheng, M. Tang, Adsorption of methylene blue by phoenix tree leaf powder in a fixed-bed column: experiments and prediction of breakthrough curves, *Desalination*, 245, 284-297(2009).
 20. R. Senthilkumar, K. Vijayaraghavan, M. Thilakavathi, P.V.R. Iyer, M. Velan, Seaweeds for the remediation of wastewaters contaminated with zinc(II) ions, *J. Hazard. Mater.*, 136, 791-799(2006).
 21. I. Goodfellow, Y. Bengio, A. Courville, *Deep learning*, MIT press, 2016.
 22. Y. Deng, X. Zhou, J. Shen, G. Xiao, H. Hong, H. Lin, F. Wu, B.-Q. Liao, New methods based on back propagation (BP) and radial basis function (RBF) artificial neural networks (ANNs) for predicting the occurrence of haloketones in tap water, *Sci. Total Environ.*, 772, 145534(2021).
 23. S. Mouloudi, H. Rahmanpanah, S. Gohari, C. Burvill, H.M. Davies, Feedforward backpropagation artificial neural networks for predicting mechanical responses in complex nonlinear structures: A study on a long bone, *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 128, 105079(2022).
 24. Z.Z. Chowdhury, S.B. Abd Hamid, S.M. Zain, Evaluating design parameters for breakthrough curve analysis and kinetics of fixed bed columns for Cu(II) cations using lignocellulosic wastes, *BioResources*, 10, 732-749(2015).
 25. A. Anfruns, M.J. Martín, M.A. Montes-Morán, Removal of odorous VOCs using sludge-based adsorbents, *Chem. Eng. J.*, 166, 1022-1031(2011).
 26. D.C.K. Ko, J.F. Porter, G. McKay, Optimised correlations for the fixed-bed adsorption of metal ions on bone char, *Chem. Eng. Sci.*, 55, 5819-5829(2000).
 27. S. Jafari, F. Ghorbani-Shahna, A. Bahrami, H. Kazemian, Adsorptive removal of toluene and carbon tetrachloride from gas phase using Zeolitic Imidazolate Framework-8: Effects of synthesis method, particle size, and pretreatment of the adsorbent, *Microporous Mesoporous Mater.*, 268, 58-68(2018).
 28. Y. Long, Q. Li, J. Ni, F. Xu, H. Xu, Treatment of metal wastewater in pilot-scale packed bed systems: efficiency of single- vs. mixed-mushrooms, *RSC Advances*, 5, 29145-29152(2015).
 29. R. Su, Z. Li, X. Ma, Y. Li, Z. Zeng, L. Li, P. Sheng, H. Wang, S. Wang, Machine learning, experiments and molecular simulation demonstrate the adsorption mechanism of acetone on porous carbon at different pressures, *Sep. Purif. Technol.*, 323, 124480(2023).
 30. C. Cardenas, L. Sigot, C. Vallières, S. Marsteau, M. Marchal, A.M. Latifi, Ammonia capture by adsorption on doped and undoped activated carbon: Isotherm and breakthrough curve measurements, *Sep. Purif. Technol.*, 313, 123454(2023).

Declaration of Competing Interest

The authors declare that they have no known competing interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Authors and Contribution Statement

Mita Nurhayati

Department of Advanced Science and Technology Convergence, Kyungpook National University, Ph.D. student, [ORCID](#) 0000-0003-3477-1674: Data curation, Data analysis, Methodology, Visualization, Writing - original draft.

Bum Ui Hong

Bio Resource Center, Institute for Advanced Engineering, Principal Researcher, [ORCID](#) 0000-0001-5358-2049: Funding acquisition, Project administration, Data curation, Methodology.

Ho Geun Kang

BIN-TECH KOREA Co., Ltd, Research Director, [ORCID](#) 0000-0002-8096-9959: Funding acquisition, Resources, Conceptualization, Writing - review and editing.

Sungyun Lee

Department of Environmental and Safety Engineering, Kyungpook National University, Assistant Professor, [ORCID](#) 0000-0002-5812-8571: Funding acquisition, Project administration, Resources, Writing - review and editing.