

## 불포화대 및 포화대 내PFAS 수송 기작 및 수치 모델링 연구 동향 리뷰

김태훈\* · 이승학 · 정재식 · 김상현

한국과학기술연구원 물자원순환연구단

### A Review of PFAS Transport Mechanisms and Numerical Modeling in Unsaturated and Saturated Zones

Taehoon Kim\*, Seunghak Lee, Jaeshik Chung, and Sanghyun Kim

Center for Water Cycle Research, Korea Institute of Science and Technology, Seoul, Republic of Korea

#### ABSTRACT

This paper reviews international research trends on per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) transport mechanisms and numerical modeling in subsurface environments. PFAS transport is governed by complex retardation mechanisms including non-equilibrium sorption, air-water interface (AWI) adsorption, and competitive sorption, with dynamic behavior associated with varying moisture conditions particularly in the vadose zone. Numerical models for simulating these processes have evolved from simple equilibrium-sorption-based approaches to multi-process rate-limited mass-transfer (MPMT) models. Representatively, HYDRUS effectively captures complex transport phenomena in the vadose zone by coupling a proven numerical platform with a PFAS-specific AWI module, MPMT-based models provide the most sophisticated interpretation of diverse retardation mechanisms through continuous model updates, and MODFLOW-based models are well-suited for comprehensive groundwater flow system analysis at site and watershed scales. Analysis of scale-dependent modeling studies reveals that the dominant factors controlling PFAS transport vary distinctly with scale: mass transfer limitations within thin water films at the pore scale, non-equilibrium sorption-desorption kinetics and competitive adsorption at the laboratory scale, and partition coefficients and hydrogeological characteristics at the field scale. Domestic PFAS research has focused primarily on treatment technologies, toxicity assessment, and contamination surveys, leaving subsurface transport modeling research at an early stage. Future research efforts should address the development of transport parameter databases suitable for domestic soil conditions, site-scale modeling studies reflecting source-specific characteristics, and methodologies for upscaling laboratory-scale parameters to field scales. This paper aims to contribute to the advancement of domestic research through a systematic review of PFAS transport mechanisms and numerical modeling.

**Key words :** PFAS Transport, Numerical modeling, Retardation Mechanism, Air-water Interface Adsorption, Subsurface Environment

#### 1. 서 론

과불화화합물(Per- and polyfluoroalkyl substances, PFAS)은 탄소-불소(C-F) 결합의 높은 안정성으로 인해 환경 내에서

잘 분해되지 않아 ‘영원한 화학물질’로 불리며, 전 세계적인 환경 문제로 대두되고 있다(Sharma et al., 2024; US EPA, 2024). 이들은 인체 내 장기간 축적 시 암 유발, 지질 대사 이상 및 면역 체계 교란 등 심각한 위해성을 가지며, 생태계에서는 생물 농축을 통해 지속적인 악영향을 미친다(Ankley et al., 2021; Fenton et al., 2021). 이에 따라 미국과 유럽 등 국제 사회는 이를 시급한 관리 대상으로 지정하고 규제 마련에 박차를 가하고 있다(HEPA, 2025; U.S. EPA, 2024). 이러한 화합물들은 소수성(hydrophobic)과 소유성(oleophobic)을 동시에 갖는 독특한 화학적 특성으로 인해 수성막포 소화약제(Aqueous Film-Forming Foam, AFFF),

주저자: 김태훈, 박사후연구원

공저자: 이승학, 책임연구원(연구단장); 정재식, 책임연구원;  
김상현, 선임연구원

\*교신저자: 김태훈, 박사후연구원

E-mail: kth6379@kist.re.kr

Received : 2025. 12. 18 Reviewed : 2026. 01. 19

Accepted : 2026. 02. 09 Discussion until : 2026. 04. 30

산업용 코팅제, 생활용품 등에 광범위하게 사용되어 왔으며, 소방 훈련장, 산업시설, 폐수처리시설 등 다양한 오염원으로 부터 토양과 지하수 환경으로 지속적으로 유입되어 왔다 (Lyu et al., 2022). 불포화대(vadose zone 또는 unsaturated zone)는 PFAS가 수십 년간 축적되는 주요 저장소로, 강우나 지하수위 변동에 의해 지하수로 재용출되어 장기적인 2차 오염을 유발할 수 있다 (Guo and Brusseau, 2024). 포화대(saturated zone)에서는 용해된 PFAS가 지하수 흐름을 따라 광범위하게 확산될 수 있어, 이들의 지중 거동 및 수송 메커니즘을 정확히 이해하고 예측하는 것이 매우 중요하다.

PFAS의 지중 이동은 이류(advection), 분산(dispersion)과 같은 물리적 수송 과정과 더불어, PFAS 고유의 물리화학적 특성에서 비롯되는 복합적인 상호작용 메커니즘에 의해 제어된다. PFAS의 이동성을 결정하는 주요 요인 중 하나는 토양 입자와의 흡착(adsorption)으로, 이는 비평형(non-equilibrium) 특성을 보이며 흡·탈착 속도가 수송 과정에 중요한 영향을 미친다 (Sima and Jaffe, 2021). 또한 PFAS의 계면활성 특성은 불포화대에서 공기-물 계면(Air-Water Interface, AWI) 흡착이라는 독특한 지체 (retardation) 기작을 유발하며, 실제 오염 현장에서는 다양한 PFAS 종이 혼재하여 흡착 부위를 두고 경쟁하는 복합적 거동이 나타난다(Brusseau and Guo, 2021; Huang et al., 2022; Kolade et al., 2026). 이러한 다중 프로세스가 동시에 작용하여 PFAS의 지중 거동을 지배하므로, 이를 정량적으로 이해하고 예측하는 것이 필수적이다.

이러한 복잡한 지중 거동을 정량적으로 예측하고 평가하기 위해 다양한 수치 모델이 개발 및 적용되고 있다. 초기 모델은 주로 이류-분산 방정식(ADE)에 선형 평형 흡착 개념을 결합한 형태였으나, 비평형 흡착, AWI 흡착, 계면활성제 유발 유동(surfactant-induced flow)과 같은 비이상적 거동을 모사하기 위해 점차 고도화된 수치 모델이 개발되었다(Li et al., 2023). 그러나 실제 오염 현장은 다양한 PFAS가 혼재하는 복합 오염 상태이며, 전구물질의 변환 과정, 실험실 규모 매개변수의 현장 규모 확장 등 여전히 많은 과제가 남아있다 (Guo and Brusseau, 2024; Sookhak Lari et al., 2024). 특히 미국을 중심으로 최근 모델이 빠르게 개발 및 업데이트되고 있으나, 국내에서는 관련 연구 기반이 아직 확립되지 않아 최신 연구 동향에 대한 체계적인 정리가 요구된다.

따라서 본 논문에서는 PFAS의 지중 환경 내 거동 및 수송 메커니즘에 대한 최신 연구 동향을 종합적으로 분석하고, 특히 다양한 물리화학적 프로세스를 정량적으로 예

측하기 위한 수치 모델링 연구의 현주소와 향후 과제를 고찰하고자 한다. 또한 이를 바탕으로 국내 연구 현황을 진단하고, 향후 국내 PFAS 오염 문제 해결에 필요한 모델링 연구의 방향성을 제시하는 것을 목표로 한다. 다만, 본 논문은 지중 환경 내 물리적 수송과 지체 메커니즘에 초점을 맞추며, 휘발, 화학적 분해, 생물농축 등 상변화 반응을 포함한 모델링은 다루지 않는다.

## 2. 연구동향

### 2.1. 국내외 연구 과제 동향

PFAS가 환경과 인체에 미치는 심각성이 대두되면서, 미국과 유럽을 중심으로 규제 마련과 함께 문제 해결을 위한 대규모 연구 투자가 이루어지고 있다. 미국 환경보호청(Environmental Protection Agency)은 인프라법(Bipartisan Infrastructure Law, BIL)을 통해 PFAS 및 신규 오염물질 대응에 약 90억 달러 이상의 자금을 확보하는 등 포괄적인 대응 전략을 추진하고 있으며(U.S. EPA, 2024), 미국 방부(Department of Defense, DoD)는 특히 전략적 환경 연구개발 Strategic Environmental Research and Development Program, SERDP) 및 환경 안보 기술 인증 프로그램(Environmental Security Technology Certification Program, ESTCP)을 통해 2011년 이후 200개 이상의 관련 연구 개발 프로젝트에 2억 5천만 달러 이상을 투자하고 있다(U.S. DoD, 2022). 이러한 국가 주도형 연구들은 대체 물질 개발이나 독성 평가뿐만 아니라, 오염의 확산 범위를 예측하고 정화 효율을 최적화하기 위한 ‘지중 거동 기작 규명 및 수송 모델링’을 핵심 연구 분야로 포함하고 있다.

유럽연합(EU)은 유럽 그린딜(European Green Deal)과 ‘지속가능성을 위한 화학물질 전략(Chemicals Strategy for Sustainability)’의 일환으로 PFAS 문제에 대응하고 있다. EU의 연구혁신 프로그램인 호라이즌 유럽(Horizon Europe)을 통해 다수의 범유럽 컨소시엄 연구 과제가 지원되고 있으며, 대표적으로 ZeroPM(Zero Pollution of Persistent and Mobile substances)과 SCENARIOS(Solutions and recommendations for a clean, healthy, and sustainable future) 프로그램이 PFAS의 환경 거동 분석, 모델링, 대체 물질 개발 등을 목표로 진행 중이다. 이외에 중국, 캐나다, 영국, 호주 및 뉴질랜드를 포함한 환경 분야 연구개발 투자 상위국가에서도 PFAS 오염의 규모와 확산 경로를 규명하기 위한 국가 주도형 자체 연구가 수행되고 있다(ECCC, 2025; HEPA, 2025; Pemberton, 2021)

국내에서도 규제 동향 분석과 대응 방안 마련 등 정책적

수요에 맞추어 개별 과제 형태로 연구가 수행되고 있으며, 주로 규제 대응을 위한 대체 물질 및 처리 기술 개발, 오염 실태조사 및 모니터링 등에 초점을 맞추고 있다(Cho, 2025; Lee et al., 2024; Park et al., 2025). 그러나 PFAS의 오염의 규모와 확산 경로를 규명하기 위한 국가 주도형 연구개발 프로그램은 아직 부재한 실정이다.

2.2. 국내외 연구 논문 동향

전 세계의 PFAS의 지중 수송에 관한 수치 모델링 연구 동향을 분석하기 위하여 2025년까지 수집된 Scopus 데이터베이스를 활용하였다. 우선 “PFAS AND transport”를 검색어로 설정하여 PFAS 수송과 관련된 전반적인 연구를 수집하였다. 이후, 지중 환경으로 범위를 한정하기 위해 “(PFAS AND transport) AND (subsurface keywords)”로 추가

검색하였으며, *subsurface keywords*에는 soil, groundwater, unsaturated zone, vadose zone, 그리고 saturated zone를 포함시켰다(즉, *subsurface keywords* = “soil” OR “groundwater” OR “unsaturated zone” OR “vadose zone” OR “saturated zone”). 마지막으로, 수치 모델링 연구에 초점을 맞추기 위해 “(PFAS AND transport) AND (*subsurface keywords*) AND (modeling)”을 검색어로 설정하여 관련 논문을 선별하였다.

“PFAS AND transport”로 검색어를 설정한 결과, 2010년을 시작으로 2025년까지 관련 논문 수가 지속적으로 상승하여 총 939편이 검색되었다(Fig. 1a). 이어 지중 환경으로 범위를 한정한 “(PFAS AND transport) AND (*subsurface keywords*)” 검색어에서는 2014년 이후부터 관련 연구가 본격적으로 발표되기 시작하였으며, 총 351편이 확인되었

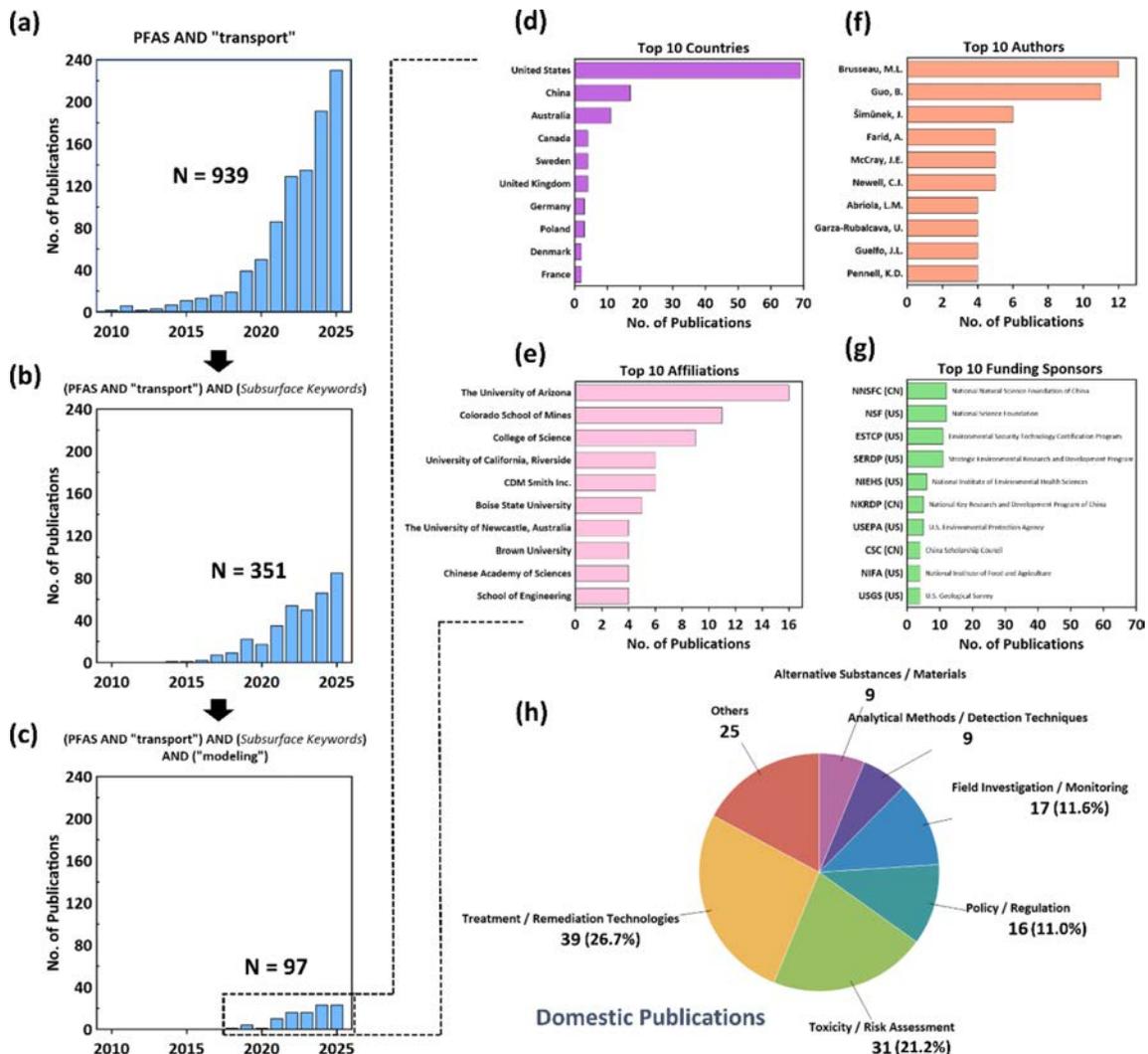


Fig. 1. Analysis of domestic and international research trends on PFAS transport (Scopus and KCI databases, up to October 2025).

다(Fig. 1b). 마지막으로, 지중 환경에서 PFAS 수송을 수치적으로 모사한 연구를 대상으로 “(PFAS AND transport) AND (subsurface keywords)” AND (modeling)”을 검색한 결과, 비교적 최근인 2018년 이래로 논문 수가 집계되기 시작하여 총 97편이 확인되었다(Fig. 1c). 즉, PFAS 수송과 관련된 전체 939편의 연구 중 약 10% 수준이 지중환경 모델링을 다루고 있으며, 해당 분야가 최근 새로운 연구 주제로 부상하고 있음을 알 수 있다.

수집된 97편의 논문을 기반으로 국가 및 연구기관별 연구 동향을 분석한 결과, 이 분야를 선도하는 상위 10개 국가 및 연구 그룹을 도출하였다(Fig. 1d). 가장 활발한 연구 활동을 보이는 국가는 미국으로, 전체 논문의 약 71%에 해당하는 69편에 참여하고 있었다. 그 뒤를 중국(17편)과 호주(11편)가 잇고 있으며, 이들 세 국가가 전체 연구의 대부분을 차지한다. 미국 내 주요 연구기관별 분석 결과, 애리조나 대학교(The University of Arizona), 콜로라도 광산대학(Colorado School of Mines), 그리고 애리조나 대학교 이과대학(College of Science)이 각각 16편, 11편, 9편의 논문에 기여하여 핵심 연구 기관으로 확인되었다(Fig. 1e). 저자별로는 애리조나 대학교의 Mark Brusseau 및 Bo Guo가 각각 12편과 11편의 논문으로 높은 기여를 하고 있으며, 캘리포니아 대학교(University of California)의 Jiří Šimůnek이 6편의 논문으로 뒤를 이었다. 이 외에도 콜로라도 광산대학의 Jeff Silva, 브라운 대학교(Brown University)의 Linda Abriola 및 Kurt Pennell, 그리고 GSI

Environmental사(社)의 Charles Newell 등이 주요 연구자로 확인되었다. 이들 연구진은 주로 미 국방부의 SERDP/ESTCP 프로그램과 연계된 연구를 수행하고 있으며, 분석 결과 각각 11편의 연구가 해당 프로그램의 지원을 받은 것으로 나타났다(Fig. 1g).

한편, 국내에서는 PFAS의 수송 및 수치 모델링과 관련된 연구 성과가 아직 뚜렷하게 나타나지 않고 있다. 한국학술지인용색인(KCI)에 등재된 과불화화합물(PFAS) 관련 학술 논문 146편(2008~2025)을 분석한 결과, 연구 주제는 주로 처리·정화 기술(39편, 26.7%), 독성·위해성 평가(31편, 21.2%), 실태조사·모니터링(17편, 11.6%), 그리고 정책·규제(16편, 11.0%) 분야에 집중되어 있었다(Fig. 1h). 반면, 지하수 및 토양 내 수송 기작을 다룬 수치 모델링 연구는 검색되지 않았으며, 확인된 지하수 관련 논문 3편 또한 활성탄 흡착 등 처리 및 제거 기술에 초점을 두고 있었다.

### 2.3. PFAS 지중환경 거동 수치 모델 발전 동향

PFAS 거동 수치 모델링의 초기 연구는 주로 포화된 지하수 환경(포화대)을 가정하고, 전통적인 유기오염물질 수송 모델링 프레임워크를 적용하는 데서 출발하였다(Fig. 2a). 이 시기의 모델들은 PFAS 이동을 지배하는 주요 인자로 토양 유기물 및 광물 입자와의 고체상(solid-phase) 흡착을 중심으로 고려하였으며, 다양한 지체 현상을 실험 값들에 기반하여 얻어진 단일 계수로 합쳐서 표현하였다(Higgins and Luthy, 2006). 이러한 결과를 기반으로 대부분의 초기

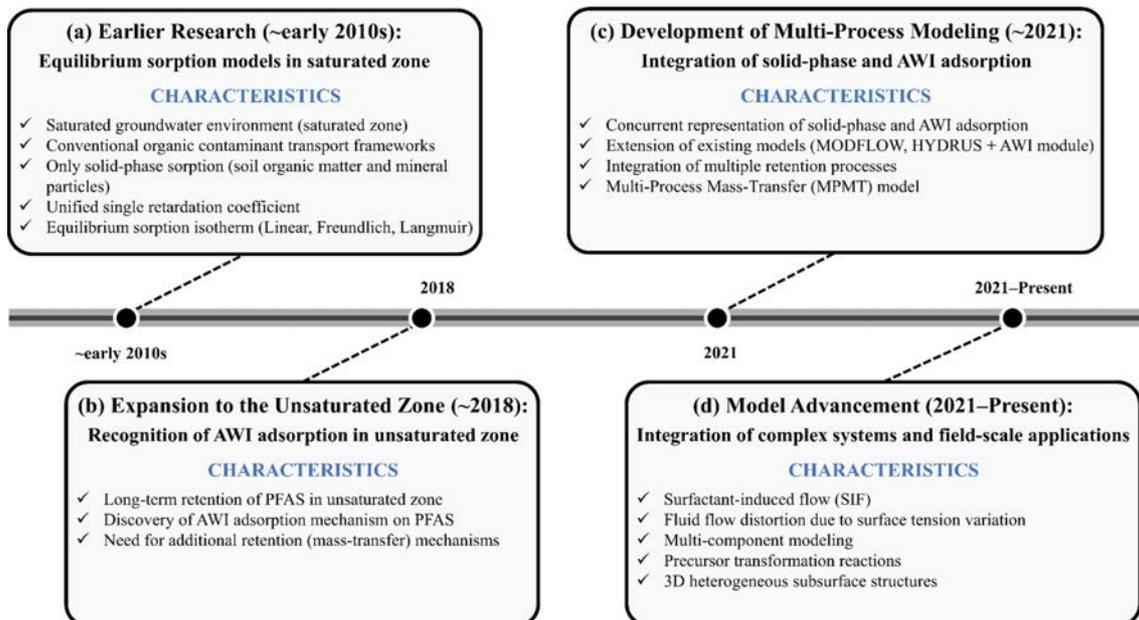


Fig. 2. Evolution of numerical models for PFAS fate and transport in saturated zone and unsaturated zone.

연구는 이류-분산 방정식(Advection-dispersion equation)에 선형(Linear), 프로인들리히(Freundlich), 또는 랭뮤어(Langmuir) 등온식과 같은 평형 흡착 모델을 결합하여 PFAS의 거동을 기술하였다(Sima and Jaffe, 2021).

이후 연구의 초점이 포화대에서 불포화대(vadose zone)로 확장되면서, 불포화대 내 잔류하는 PFAS가 장기적인 2차 오염원으로 작용한다는 현장 관측 결과들이 축적되었으며, 이러한 거동이 기존의 평형 기반 고체상 흡착 모델만으로는 충분히 설명하기 어렵다는 인식이 확산되었다(Fig. 2b)(Guo and Brusseau, 2024). Lyu et al. (2018)은 컬럼 실험을 통해 PFAS의 계면활성 특성이 불포화대 내 공기-물 계면(air-water interface, AWI)에서 강력한 흡착을 유도함을 실증하였으며, PFAS의 지중 수송 과정에서 고체상 흡착 외 불포화대 내 AWI 흡착의 정량적 고려 필요성을 제기하였다.

이러한 인식을 바탕으로 연구자들은 고체상과 AWI 흡착을 동시에 반영하는 다중 프로세스 모델(multi-process models)을 개발하기 시작하였다(Fig. 2c). MODFLOW, HYDRUS와 같은 기존 지중환경 물질 수송 모델에 AWI 흡착 항을 추가하여 그 영향을 평가하는 접근이 시도되었으며(AECOM, 2020; Hort et al., 2024), 나아가 PFAS의 고체상 및 AWI에서의 속도 제한적(rate-limited) 흡·탈착과 물리적 비평형(physical non-equilibrium) 거동을 통합적으로 모사하는 MPMT(Multi-Process rate-limited Mass-Transfer) 개념 기반 전용 수치 모델이 개발되었다 (Brusseau, 2020; Guo et al., 2020).

최근 모델링 연구는 실제 오염 현장의 복잡성을 재현하기 위하여 다중 프로세스 개념을 고도화하는 방향으로 진화하고 있다(Fig. 2d). AFFF 사용 지역과 같은 고농도 PFAS 오염 조건에서는 기존의 단순화된 가정들이 더 이상 유효하지 않으며, 비이상적 거동이 뚜렷하게 나타난다. Brusseau

et al.(2021)은 고농도의 PFAS 용액이 물의 표면장력을 변화시켜 공극 내 유체 흐름을 왜곡시키는 ‘계면활성제 유발 유동(surfactant-induced flow, SIF)’ 현상을 실험과 모델링을 통해 규명하였다. 나아가, 불포화대에서 수분함량 변화에 따른 AWI 흡착량의 변화를 고려하여 더욱 정교한 PFAS 거동 현상을 모사하였다(Chen and Guo, 2023). 또한 실제 오염 부지에는 다양한 종류의 PFAS가 혼재되어 존재하므로, 화학종(species) 간 경쟁 흡착(competitive adsorption)과 상호작용을 고려한 다성분(multi-component) 모델의 필요성이 제기되고 있다(Kolade et al., 2026). 궁극적으로, 이러한 다중 프로세스와 동적 환경을 동시에 고려하는 통합적 모델을 3차원 불균질 지반 구조에 적용하여 현장 규모에서 PFAS의 장기적 확산을 예측하고 정화 전략의 효율성을 평가하는 것이 PFAS 수치 모델링 연구의 핵심 목표로 자리 잡고 있다.

**3. 포화대 및 불포화대에서 과불화화합물의 주요 수송 기작**

PFAS의 지중 수송은 이류와 분산이라는 기본적인 물리적 프로세스와 더불어, PFAS 고유의 물리화학적 특성에서 비롯되는 복합적 지체 기작에 의해 지배된다. 특히, 비평형 흡착, 계면 흡착, 및 경쟁 흡착이 PFAS의 이동 속도 및 지체 효과를 결정하는 핵심 요소로 알려져 있다(Fig. 3). 본 섹션에서는 이러한 주요 수송 기작을 수치 모델링으로 기술하기 위해 사용되는 수학적 모델과 방법론을 기술한다.

**3.1. 비평형 고체상 흡착**

PFAS가 지중 환경을 통과할 때, 용존 상의 PFAS 분자는 고체상 입자 표면에 흡착되어 일시적 또는 반영구적으로 체류한다(Fig. 3a). 이는 PFAS의 이동 속도를 제어하는 주된 원인으로 작용하며, 특히 포화대에서 중요한 기작이

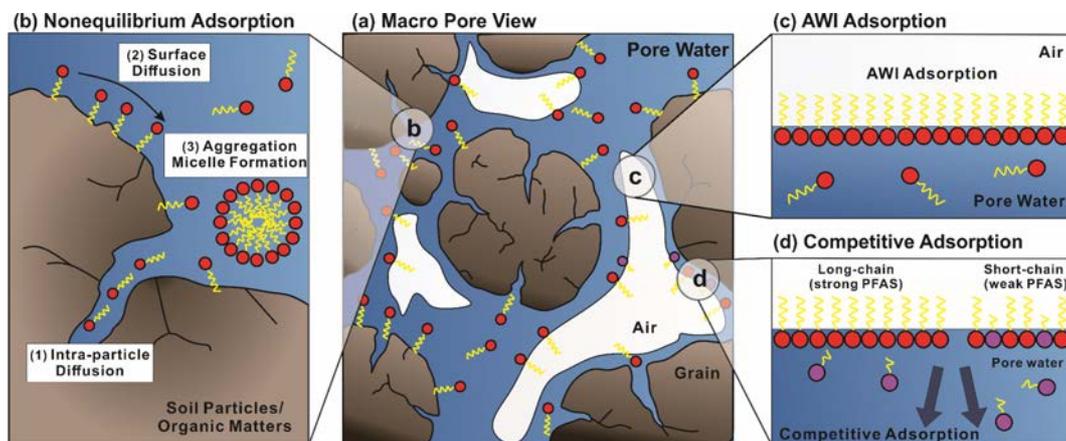


Fig. 3. Conceptual illustration of major retardation mechanisms governing PFAS subsurface transport.

다. 흡착 반응이 충분히 빨라 국부적 평형(local equilibrium) 상태가 유지된다는 가정하에서, 용액 내 PFAS 농도( $C$ )와 고체상에 흡착된 PFAS 농도( $S$ ) 사이의 관계는 주로 전통적인 흡착 등온식(isotherm) 모델을 통해 정량화된다(Sima and Jaffe, 2021). 대표적인 평형 흡착 모델로는 선형 등온식, 프로인드리히 등온식 및 랭뮤어 등온식 등이 포함된다(Text S1).

그러나 실제 지중 환경에서 PFAS의 흡착-탈착 과정은 단순한 평형 가정으로 설명하기 어렵다. 토양 입자 내부 확산(intraparticle diffusion), 표면 확산(surface diffusion), 그리고 분자 간 응집 및 미셀(micelle) 형성과 같은 요인들이 복합적으로 작용하여 속도 제한적 혹은 비평형적(non-equilibrium) 거동을 초래한다(Fig. 3b). 입자 내부 확산이란 점토 광물이나 유기물 응집체 내에서 PFAS 분자가 미세 공극을 따라 느리게 확산하며 평형에 도달하기까지 시간이 소요되는 현상, 표면 확산이란 표면을 따라 이동하는 PFAS에 의해 물질 전달 속도를 증가시키고 농도 구배를 완화시키는 현상을 말한다(Brusseau et al., 2019a; Schaefer et al., 2021). 또한 고농도 조건에서는 PFAS 분자 간의 응집 또는 미셀 형성이 가속되어 해리 속도가 더욱 감소하고, 이러한 비가역적 상호작용은 흡-탈착의 비평형성을 강화한다(Bhatarai and Gramatica, 2011).

이러한 PFAS의 비평형적 거동 특성을 수치적으로 고려하기 위해 가장 단순한 접근은 널리 사용되는 1차 속도론적 모델(First-order kinetic rate model)로, 고체상 흡착 농도 변화가 용액 농도와의 평형 차이에 비례한다고 가정한다(Lagergren, 1898):

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \alpha(K_d \cdot C - S) \quad (1)$$

여기서  $S$ 는 고체상 흡착 농도(mg/kg),  $C$ 는 수용액상 PFAS 농도(mg/L),  $\alpha$ 는 1차 흡착 또는 탈착 속도 상수(1/h),  $K_d$ 는 분배 계수(L/kg)를 의미한다. 이 모델은 비평형 흡착의 기본 개념을 단일 속도 상수로 단순화하여 표현하지만, 실제 토양의 불균질한 흡착 표면 특성을 충분히 반영하기에는 한계가 있다. 이를 보완하기 위해 제안된 이중 지점 모델(Two-Site Model, TSM)은 전체 흡착 부위를 즉시 평형에 도달하는 부위(site 1)와, 1차 속도론에 따라 느리게 반응하는 부위(site 2)로 구분한다(Cameron and Klute, 1977; Xing et al., 2021).

$$\begin{aligned} S_{total} &= S_1 + S_2 \\ S_1 &= f \cdot K_d \cdot C \\ \frac{\partial S_2}{\partial t} &= \alpha[(1-f) \cdot K_d \cdot C - S_2] \end{aligned} \quad (2)$$

여기서  $S_{total}$ 은 총 흡착 농도,  $f$ 는 즉각 평형에 도달하는 흡착 지점의 비율( $0 \leq f \leq 1$ ),  $\alpha$ 는 속도 상수,  $K_d$ 는 분배 계수,  $C$ 는 수용액상 농도를 의미한다. TSM은 흡착 지점의 이질성을 고려함으로써 실험에서 관찰되는 비평형적 거동을 보다 잘 재현할 수 있다. 마지막으로, 다중 속도 모델(Multi-rate model)은 1차 속도론적 모델과 TSM의 확장 형태로, 다양한 시간 규모의 흡착-탈착 과정을 동시에 고려한다(Brusseau et al., 2019a).

$$S_{total} = \sum_i S_i, \text{ where } \frac{\partial S_i}{\partial t} = \alpha_i(K_{d,i} \cdot C - S_i) \quad (3)$$

이 모델은 각 미세 환경 또는 흡착 부위마다 다른 속도 상수( $\alpha_i$ )와 분배 계수( $K_{d,i}$ )를 부여함으로써, 실제 토양 내의 미세공극 확산, 표면 확산, 그리고 응집에 의한 단단계 흡-탈착 과정과 같은 복합적 속도 제한 현상을 보다 물리적으로 타당하게 모사할 수 있다.

### 3.2. 공기-물 계면 흡착

불포화대에서는 토양 공극 내에 물과 공기가 공존하기 때문에, 수많은 공기-물 계면(air-water interface, AWI)이 형성된다. 친수성 머리와 소수성 꼬리 형태를 가지는 PFAS는 계면활성 특성으로 인해 이들 계면에 선택적으로 농축되며, 이는 불포화대에서 PFAS의 이동을 지체시키는 핵심적인 기작으로 작용한다(Fig. 3c).

단일 PFAS 성분에 대한 AWI 흡착량( $S_{aw}$ )은 단위 부피당 AWI 면적( $A_{aw}$ , 1/cm)과 AWI 분배 계수( $k_{aw}$ , cm), PFAS 농도  $C$  (mol/L)의 곱으로 표현할 수 있다 ( $S_{aw} = k_{aw} A_{aw} C$ ). 여기서  $k_{aw}$ 는 PFAS의 분자 구조와 용액의 화학적 조건에 따라 달라지며, 계면 흡착에 의한 표면 장력(surface tension,  $\gamma$  (dyn/cm)) 변화로부터 깁스 흡착 등온식(Gibbs adsorption isotherm)을 통해 계산할 수 있다(Martínez-Balbuena et al., 2017).

$$k_{aw} = \frac{\Gamma}{C} = -\frac{1}{RT} \frac{\partial \gamma}{\partial C} \quad (4)$$

여기서  $\Gamma$ 는 AWI 계면 흡착 농도(surface excess, mol/cm<sup>2</sup>),  $R$ 은 기체 상수(J/(mol·K)),  $T$ 는 절대 온도(K)를 나타낸다.

고농도 PFAS 조건에서는 AWI 흡착 역시 비선형성을 보일 수 있으며, 이 경우 랭뮤어 형태의 Langmuir-Szyszkowski 모델이 적용되어 PFAS의 계면 포화 특성을 보다 현실적으로 설명할 수 있다(Guo et al., 2023).

$$\Gamma = \Gamma_{max} \cdot \frac{K_i \cdot C}{1 + K_i \cdot C} \quad (5)$$

여기서  $\Gamma_{max}$ 는 AWI에서의 표면장력, PFAS의 표면 활성도, 그리고 피복률(surface coverage)의 함수로 나타나는 최대 계면 흡착 농도(maximum fluid-fluid interfacial adsorption, mol/cm<sup>2</sup>)이며,  $K_i$ 는 Langmuir-Szyszkowski 상수 (L/mol)이다. 이 모델은 농도  $C$  (mol/L)가 낮을 때는 선형 거동( $\Gamma \approx \Gamma_{max} \cdot K_i \cdot C$ )을 보이다가,  $C$ 가 증가할수록 점차 포화에 접근하는 특성을 재현한다.

AWI 흡착 또한 고체상 흡착과 유사하게 속도 제한적 특성을 보일 수 있으며, 최근 연구를 통해 토양의 수분 포화도, PFAS 시슬 길이에 따른 계면활성도 차이, 용액의 이온 강도와 전하 상태 등이 중요한 영향을 미칠 수 있음이 밝혀졌다(Lyu et al., 2022). 이는 3.5 절에서 추가로 논의한다.

### 3.3. 경쟁 흡착

실제 오염 부지에서는 다양한 종류의 PFAS가 혼합물 형태로 존재하므로, 이들 간의 흡착 부위 경쟁(competitive adsorption)은 개별 물질의 이동성에 큰 영향을 미친다. 이러한 현상을 모사하기 위해 경쟁 흡착 모델이 사용되며, 가장 널리 적용되는 형태가 다성분 랭뮤어 등온식(Multi-component Langmuir Isotherm)이다. 두 종류의 PFAS (성분  $e_1$  및  $e_2$ )가 동일한 고체상 흡착 부위에 경쟁적으로 결합한다고 가정하면, 각 성분의 평형 흡착량( $S_{e1}$ ,  $S_{e2}$ , mg/kg)은 다음과 같이 표현된다:

$$S_{e1} = \frac{S_{max,1} b_{L1} C_{e1}}{1 + b_{L1} C_{e1} + b_{L2} C_{e2}} \quad (6)$$

$$S_{e2} = \frac{S_{max,2} b_{L2} C_{e2}}{1 + b_{L1} C_{e1} + b_{L2} C_{e2}} \quad (7)$$

여기서  $S_{max,i}$ 는 각 성분의 최대 흡착 용량(mg/kg),  $b_{Li}$ 는 랭뮤어 흡착 상수(L/mg),  $C_{ei}$ 는 용액 내 평형 농도(mg/L)를 의미한다. 이 모델은 한 성분의 농도가 증가할수록 다른 성분의 분모 항이 커지면서 흡착량이 감소하는 관계를 보여준다.

고체상 흡착과 마찬가지로, 여러 종류의 PFAS가 공존할 경우 AWI에서도 경쟁 흡착이 발생한다. 이러한 경쟁은 각 PFAS의 표면 활성도(surface activity) 차이에서 기인하며, 일반적으로 장쇄 PFAS가 단쇄 PFAS보다 계면 친화도가 높아 계면 부위를 우선적으로 점유한다(Fig. 3d). 그 결과, 표면 활성이 약한 단쇄 PFAS의 계면 흡착이 억제되고, 상대적으로 이동성이 증가하는 현상이 나타난다(Brusseau and Van Glubt, 2019). 이 경쟁 효과의 강도는 또한 용액 내 PFAS의 농도 수준에 크게 의존한다. Huang

et al. (2022)은 perfluoro-octane sulfonic acid (PFOS)와 다른 PFAS가 혼합된 불포화 컬럼 실험에서, 고농도 조건에서는 다른 PFAS의 존재가 PFOS의 AWI 흡착을 유의미하게 감소시켜 이동성을 증가시킨 반면, 저농도 조건에서는 이러한 경쟁 효과가 거의 관찰되지 않음을 보고하였다.

이 현상은 고체상에서와 마찬가지로 다성분 랭뮤어 등온식과 같은 방식으로 수치화될 수 있다. 두 종류의 PFAS ( $e_1$  및  $e_2$ )가 동일한 계면 부위에서 경쟁할 때, 각 성분의 평형 계면 흡착량  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$  (mol/cm<sup>2</sup>)은 다음과 같이 표현된다(Silva et al., 2021):

$$\Gamma_1 = \frac{\Gamma_{max,1} K_{L1} C_{e1}}{1 + K_{L1} C_{e1} + K_{L2} C_{e2}} \quad (8)$$

$$\Gamma_2 = \frac{\Gamma_{max,2} K_{L2} C_{e2}}{1 + K_{L1} C_{e1} + K_{L2} C_{e2}} \quad (9)$$

이 모델에서 분모의 경쟁 항( $K_{L1} C_{e1}$  또는  $K_{L2} C_{e2}$  (-))은 AWI에서 다른 PFAS의 존재가 해당 PFAS 성분의 흡착 기회를 얼마나 감소시키는지 나타내며, PFAS 간의 상호 억제적 흡착 거동을 반영한다.

### 3.4. 통합 수송 모델링 방법론

지금까지의 논의를 종합하면, PFAS의 거동은 ‘다중 계면에서 다중 속도와 다성분 질량전달이 동시에 일어나는 복합적 과정’으로 정리될 수 있다. 따라서 이러한 복합적 거동을 통합적으로 예측하기 위해서는 고체상 흡착과 계면 흡착을 모두 고려한 통합적 수치 거동 모델이 필요하다. 단일 PFAS 성분에 대한 일차원 수송은 다음의 이류-분산 방정식으로 표현된다.

$$\frac{\partial(\theta_w C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S)}{\partial t} + \frac{\partial(\theta_w S_{aw})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta_w D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial(qC)}{\partial z} \quad (10)$$

여기서  $\theta_w$ 는 수분함량(-),  $C$ 는 용존상 농도(mg/L),  $\rho_b$ 는 토양의 용적 밀도(g/cm<sup>3</sup>),  $S$ 는 고체상 흡착 농도(mg/kg),  $S_{aw}$ 는 단위 부피 당 계면 흡착량(mg/L),  $D$ 는 유효 분산 계수(cm<sup>2</sup>/h),  $q$ 는 Darcy 유속(cm/h)을 의미한다. 식 (10)

에서,  $\frac{\partial(\rho_b S)}{\partial t}$  와  $\frac{\partial(\theta_w S_{aw})}{\partial t}$  항은 각각 고체상 및 AWI에서의 흡탈착에 따른 질량전달을 나타내며, 각각 3.1절의 비평형 모델 (식 (1-3))과 3.2절의 계면 흡착 모델 (식 (4-5))로 계산된다.

평형 상태를 가정할 경우, 위 식은 다음과 같이 총괄 지체계수(retardation factor,  $R$ )를 이용한 형태로 단순화할 수 있다.

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta_w} K_d + \frac{A_{aw}}{\theta_w} k_{aw} \quad (11)$$

이 때 수분함량( $\theta_w$ )과 유속( $q$ )은 불포화대의 지하수 흐름을 지배하는 Richards 방정식으로부터 얻을 수 있다. 일차원의 Richards 방정식은 다음과 같이 나타낸다.

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\theta_w) \left( \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] + Q \quad (12)$$

여기서  $h$ 는 압력수두(cm),  $K(\theta_w)$ 는 수분함량에 따른 불포화 투수계수(cm/h),  $Q$ 는 수분의 외부 유출입량(1/h)이다. 식 (12)로부터 시간  $t$ 에서의  $\theta_w(z, t)$ 와  $q(z, t)$ 를 계산하고, 이를 식 (10)의 이류-분산 방정식에 대입하면 시간에 따라 변하는 수분 조건에서 PFAS 농도 분포를 구할 수 있다. 이러한 편미분 방정식 형태의 지배 방정식은 유한차분법(finite difference method)이나 유한요소법(finite element method)으로 이산화하여 수치적으로 구현된다.

이러한 지배 방정식은 평형 상태 도달, 균질한 매질 특성, 저농도 용액, 그리고 정상 상태의 수문 조건 등 단순화된 환경에서 유효하나, 실제 불포화대 환경에서 관찰되는 비이상적 거동 및 복합 기작을 완전히 설명하기에는 한계가 있다.

### 3.5. 비이상적 거동 및 복합 기작

불포화대에서 형성되는 AWI는 토양 입자 사이의 자유수(bulk capillary water) 영역과 입자 표면을 따라 얇게

코팅된 얇은 수막(thin water film)의 두 영역으로 구분된다(Chen and Guo, 2023). 특히 얇은 수막 내에서는 확산이 제한되고 강한 표면 상호작용으로 인해 PFAS의 이동이 지체되며, 계면에 장시간 체류하게 된다. 이러한 조건에서 고체 표면의 전기적 인력과 반데르발스 힘이 PFAS의 계면 흡착을 더욱 강화하여, 결과적으로 얇은 수막 영역이 전체 AWI 흡착량의 대부분을 차지하는 것으로 보고된다(Zhang and Guo, 2024).

PFAS의 비이상적 거동은 흡착부위의 이질성에 의해서도 증폭된다. 이러한 다중속도(multi-rate) 흡착 분포는 단일 속도 상수로 표현되는 평형 모델이나 two-site 모델로는 완전히 재현할 수 없는 복잡한 지체 효과를 유발한다. 특히 반응 부위의 확률적 분포를 고려하기 위해, 완화형 단측 안정 분포(tempered one-sided stable density, TOSD)와 같은 연속 확률 분포 모델(continuous distribution model)의 적용이 제안되고 있다(Zhou et al., 2021).

이 밖에 불포화대에서 일어나는 수리학적 동적 조건 반영이 필요하다. 불포화대의 수문 조건은 강우, 증발산, 지하수위 변동 등에 의해 끊임없이 변화한다. 지하수위 상승 시 AWI가 붕괴되면서 AWI에 흡착된 PFAS가 수용액상으로 급격히 방출되며, 이는 정상상태 평형 모델이 포착할 수 없는 비평형 효과로 나타난다(Zeng et al., 2024). 또한 고농도 PFAS는 표면장력을 저하시켜 불포화 유동 특성 자체를 변화시킬 수 있다.

마지막으로, 매질의 공간적 이질성은 국지적인 포화도와

**Table 1.** Comparison of characteristics of major numerical models used for PFAS subsurface transport modeling

Model	Category	Nonlinear Sorption	Nonequilibrium Sorption	AWI Sorption	Competitive Sorption	Flow Equation	Spatial Dimension	Developer (Reference)
VLEACH (ver. 2.2a)	Conventional RLM	× (linear only)	×	×	×	Darcy-based (steady state)	1D	US EPA (Ravi and Johnson., 1997)
PRZM (ver. 5)	Conventional RLM	Δ (Freundlich)	×	×	×	Capacity-based ('tipping bucket')	1D	US EPA (Shin et al., 2011)
PELMO (ver. 5.00)	Conventional RLM	Δ (Freundlich)	×	×	×	Capacity-based ('tipping bucket')	1D	Fraunhofer Institute IME (McLachlan et al, 2019)
SEVIEW (ver. 8.0)	Conventional RLM	●	×	×	×	Infiltration-based mass balance	1D	ESCI (SEVIEW, 2025)
LEACHM (ver. 4)	Conventional RLM	●	●	Δ (via custom AWI module, Wallis et al. 2022)	×	Richards equation	1D	Cornell Univ. (Hutson and Wagenet, 1995)
HYDRUS-PFAS	PFAS-Extended Platforms	●	●	●	×	Richards equation	1D / 2D / 3D	Univ. Colorado Mines (Silva et al., 2020)
MPMT-1D	Custom PFAS Research Models	●	●	●	●	Richards equation	1D	Univ. Arizona (Guo et al., 2020)
MPMT-2D/3D	Custom PFAS Research Models	●	●	●	●	Richards equation	2D / 3D	Univ. Arizona (Zeng and Guo, 2021)
MODFLOW-USG (USGT-PFAS)	PFAS-Extended Platforms	●	●	●	●	Richards equation	1D / 2D / 3D	GSI Environmental Inc. (Hort et al., 2024)

● = Full support Δ = Partial/Limited support × = Not supported

AWI 분포의 불균질성을 초래한다. 특히 우선 유동 경로 (preferential pathway)에서는 높은 포화도로 인해 AWI 면적이 감소하여 계면 흡착에 의한 지체 효과가 약화되고, PFAS의 빠른 침투를 유도한다(Zeng and Guo, 2021). 이러한 공간적 이질성은 실험실 규모에서 도출된 흡착 계수나 지체계수를 현장 규모로 단순히 확장 적용할 경우 예측 오차를 유발하는 주요 요인으로 작용한다.

이러한 복잡성은 PFAS 지중 수송을 정량적으로 평가하기 위한 보다 정교한 모델링 접근의 필요성을 시사한다.

#### 4. 포화대 및 불포화대 내 PFAS 수송 모델

앞서 정리한 PFAS의 복합적 수송 기작을 구현할 수 있는 다양한 수치 모델이 개발 및 응용되고 있다. 본 절에서는 농약 용탈 평가를 위해 설계된 전통적인 근권부 용탈 모델(Root-zone Leaching Models, RLMs)의 응용 사례부터 PFAS 특성을 반영해 개발된 최신 모형까지, PFAS 수송 모델링에 활용되는 주요 도구들의 개념적 기반, 작동 특성 및 적용상 한계를 고찰하고자 한다(Table 1).

##### 4.1. 근권부 용탈 모델(RLMs)

PFAS 수송 모델링의 초기 접근은 살충제나 제초제와 같은 농약의 환경 거동을 예측하기 위해 개발된 기존의 RLMs를 활용하거나 수정하는 방식으로 이루어졌다. 이러한 모델에는 대표적으로 PRZM (Pesticide Root Zone Model), PELMO (Pesticide Leaching Model), LEACHM (Leaching Estimation and Chemistry Model), RZWQM (Root Zone Water Quality Model), SESOIL (Seasonal Soil Compartment Model; ESCI), VLEACH (Vadose Zone Leaching Model) 등이 포함된다(AECOM, 2020; Gassmann, 2021). 이 모델들은 1차원 수직 토양 컬럼을 가정하여 강우, 증발산, 관개, 작물에 의한 물 흡수 등을 고려하여 물수지를 계산하고, 이를 기반으로 불포화대 내 용질의 이동을 모사한다. 그러나 Table 1에서 제시된 바와 같이, 각 모델은 지하수의 흐름을 계산하거나 흡착 기작을 구현하는 방식에서 뚜렷한 차이와 한계를 보인다.

이들 모델 내에서 지하수 흐름의 계산은 Richards 방정식(LEACHM), ‘Tipping Bucket’(PRZM, PELMO), 침투 기반 물질수지(SESOIL), Darcy 법칙에 기반한 정류 흐름(VLEACH) 등 다양한 접근법을 적용한다. 지하수의 흐름을 어떻게 지배하는지에 따라, 이류-분산 방정식에 의해 예측되는 용질 수송의 결과가 크게 달라질 수 있다. Liao et al.(2024)의 비교 연구에서, Richards 방정식 기반의

LEACHM과 HYDRUS-1D는 지표 근처의 PFAS 잔류 현상을 비교적 잘 예측한 반면, ‘Tipping Bucket’의 단순화된 물수지 용량 접근법을 사용하는 PRZM은 토양 포화 시 PFAS의 용탈을 과대평가하는 경향을 보였다.

불포화대 내 PFAS 용질 수송 시 발생하는 지체현상은 대부분 흡착에 의해 지배된다. 그러나, PRZM과 VLEACH에서는 오로지 선형 평형 흡착 기능이 제공되고 있으며, LEACHM을 제외한 대부분의 모델은 비평형 흡착을 반영하지 못하는 한계가 있다. 이러한 흡착 모사의 한계 외에도, RLMs를 PFAS에 직접 적용 시 발생하는 또 다른 제약은 PFAS 고유의 계면활성 특성을 충분히 반영하지 못한다는 점에서 비롯된다. 전통적인 RLMs는 불포화대에서 PFAS가 AWI에 강하게 흡착하여 추가적인 지체를 유발하는 현상을 고려하지 않는다(AECOM, 2020).

이러한 한계를 보완하기 위해, 최근 연구들은 RLMs의 소스 코드를 확장하여 AWI 흡착 항을 추가하는 방식으로 개선이 이루어지고 있다. 예를 들어, Wallis et al. (2022)는 LEACHM 모델에 AWI 흡착 모듈을 도입하여, 장기간 폐수 관개가 이루어진 농경지나 AFFF 오염 부지에서 PFAS 수직 거동을 모사하였다. 이 연구는 특히 장쇄 PFAS의 경우, AWI 흡착이 고체상 흡착과 동등한 수준의 주요 지체 요인으로 작용함을 보였다.

결론적으로, 전통적인 RLMs는 PFAS 오염에 대한 연구 초기에 이들의 수송을 모사하기 위한 기본적인 틀을 제공하였지만, AWI 흡착 과정, 다성분 경쟁 흡착, 전구물질의 변환, 비평형 흡착 등 비이상적 수송 과정을 구현하지 못한다는 한계가 있다.

##### 4.2. HYDRUS

HYDRUS 모델은 기존 RLMs가 갖는 개념적 한계를 보완하며, PFAS의 복잡한 거동을 보다 물리적으로 정밀하게 재현할 수 있는 수치해석 플랫폼이다. Richards 방정식 기반으로 불포화대에서의 물·열·용질 이동을 모의하는 HYDRUS는 검증된 수치 계산 성능과 비선형·비평형 흡착, 생분해, 콜로이드 수송 등 다양한 반응 및 수송 과정을 통합할 수 있는 유연성을 갖추고 있어, PFAS 수송의 핵심 메커니즘을 체계적으로 구현할 수 있다(Šimůnek et al., 2024).

Silva et al.(2020)은 HYDRUS를 PFAS에 특화된 모델로 확장하여 핵심 기능을 구축하였으며, 이후 관련 개발은 콜로라도 광산대학과 브라운 대학 연구진을 중심으로 지속적으로 고도화되었다. 이 연구를 통해 마련된 기능들은 현재 HYDRUS의 공식 PFAS 모듈(standard add-on module)로 통합되어, 1차원뿐만 아니라 2차원 및 3차원 문제에도

적용할 수 있게 되었다.

HYDRUS-PFAS 모듈의 핵심적 특징 중 하나는 AWI 흡착 과정을 동적으로 모사한다는 점이다. 이 모듈은 토양수분보유곡선(soil water retention curve, SWRC)에 기반하여 수분 함량( $\theta_w$ ) 변화에 따른 AWI의 면적( $A_{aw}$ )을 직접 계산하며, 이에 따라 강우 침투 시 토양이 습윤될 때 AWI 면적이 감소하고, 건조 시 다시 확대되는 과정을 물리적으로 재현한다.

$$A_{aw}(\theta_w) = \frac{1}{\sigma_0} \int_{\theta_w}^{\theta_s} P_{aw}(\theta_w) d\theta_w = \frac{\rho_w g}{\sigma_0} \int_{\theta_w}^{\theta_s} h(\theta_w) d\theta_w \quad (13)$$

$$\frac{dA_{aw}(\theta_w)}{d\theta_w} = \frac{P_{aw}}{\sigma_0} = \frac{\rho_w g h}{\sigma_0} \quad (14)$$

이 식들은 SWRC를 정의하는 주요 변수인 모세관 압력( $P_{aw}$  (Pa)) 또는 압력수두( $h$ , cm)를 적분하여 특정  $\theta_w$ 에서 AWI 면적이 계산되는 과정을 나타낸다. 여기서  $\theta_s$ 는 포화 수분 함량(-),  $\sigma_0$ 는 공기-물 계면 장력(dyn/cm),  $\rho_w$ 는 물의 밀도(g/cm<sup>3</sup>),  $g$ 는 중력가속도(cm/s<sup>2</sup>)를 의미한다. 이러한 접근 덕분에 거시적으로 측정 가능한 SWRC로부터 미시적이며 직접 측정이 어려운 AWI의 면적을 추정할 수 있으며, 나아가 동적으로 계산된  $A_{aw}$ 을 랭뮤어 흡착 등온식과 결합함으로써 시간에 따른 AWI 흡착량 변화를 정밀하게 예측할 수 있다.

HYDRUS-PFAS 모듈은 또한 용액 내 PFAS 농도 변화가 표면장력과 점성에 미치는 영향을 반영하고, 이로 인해 변화하는 모세관 압력 및 수리전도도까지 동적으로 연계하여 계산한다. 이러한 기능은 특히 AFFF 원액 유출과 같이 고농도 PFAS 존재 환경에서 오염 환경의 거동 평가에 유리하다(Arshadi et al., 2024).

종합하면, HYDRUS는 Richards 방정식 기반 정교한 수리동역학 해석 플랫폼 위에 PFAS 특이적 메커니즘을 통합한 PFAS 모듈을 탑재함으로써, 기존 RLMs의 개념적 한계를 넘어서는 높은 예측 성능을 제공한다. 이러한 특성으로 인해 HYDRUS는 지중환경에서의 PFAS 지체 및 이동 현상을 이해하는 데 있어 현 시점 가장 앞선 도구 중 하나로 평가된다.

### 4.3. 다중 프로세스 속도제한 물질 수송 (MPMT) 모델

다중 프로세스 속도제한 물질 수송(multi-process rate-limited mass-transfer, MPMT) 기반 모델은 미국 애리조나 대학 연구진에 의해 개발된 PFAS 특화 수송 모델로, PFAS의 불포화대 거동을 지배하는 여러 지체 기작을 개별적으로 모사하기 위한 접근법이다. Brusseau (2020); Brusseau et

al.(2019b)는 기존의 단일 파라미터 기반 지체 모사에서 벗어나, 비평형 흡착, AWI 흡착, 그리고 물리적 비평형(physical non-equilibrium) 기작을 각각 고려하여 수학적으로 계산하는 MPMT 개념을 정립하였다.

여기서 물리적 비평형이란 물질 수송과 관계된 비평형으로, 토양 공극 구조의 영향으로 유체가 활발히 이동하는 영역(advective domain)과 정체된 영역(non-advective domain)이 공존하며, 이들 간의 확산에 의한 질량 교환이 전체 수송 속도를 제한하는 현상이 대표적이다. 이 개념은 PFAS의 수송이 단순한 평형 흡착 과정이 아니라, 여러 프로세스가 속도 제한적으로 작용하는 것을 반영한다.

Guo et al. (2020)은 이러한 개념 모델을 실제 현장 조건에 적용할 수 있는 1차원 PFAS 수치 모델로 구현하였다. Richards 방정식과 이류-분산 방정식을 완전 연동(fully implicit) 또는 순차 연동(sequential implicit) 방식으로 결합하고 뉴턴-랩슨(Newton-Raphson) 기법으로 수치해를 구하였으며, 개발된 모델을 HYDRUS-1D와 PFLORAN과의 비교하여 정확도를 검증하였다.

이 모델은 HYDRUS와 유사하게 동적 불포화 흐름(transient variably saturated flow) 조건에서 계면활성으로 인한 유동(SIF), 비선형적 고체상 흡착 및 AWI 흡착을 포괄적으로 고려한다. 다만, 부피 당 AWI의 면적  $A_{aw}$ 은 토양 수분 함량( $\theta_w$ )에 대한 2차 다항식(second-degree polynomial function)으로 근사하여 계산하는 점에서 HYDRUS와 차이를 보인다.

$$A_{aw} = x_2 \theta_w^2 + x_1 \theta_w + x_0 \quad (15)$$

여기서,  $x_0$ ,  $x_1$ ,  $x_2$  (1/cm)는 실험 자료를 기반으로 피팅된 경험적 계수이다. 이후 Zeng and Guo (2021)는 해당 모델을 2차원 및 3차원으로 확장하여, 1차원 모델에서는 해석이 어려웠던 지중 환경의 이질성과 SIF의 다차원적 효과를 분석하였다.

종합하면, 애리조나 대학 연구진에 의해 발전된 MPMT 기반 모델링 접근법은 PFAS의 불포화대 거동이 다중 지체 기작의 복합적 상호작용에 의해 지배된다는 점을 개념적으로 정립하고, 이를 수치적으로 구현하였다. 이 연구 그룹은 경쟁 흡착(Huang et al., 2022) 및 표면 확산(Zhang and Guo, 2024) 등 새로운 수송 기작을 지속적으로 규명하고 이를 모델에 단계적으로 반영함으로써, PFAS 거동 예측의 불확실성을 줄이고 모델의 지배 방정식을 정교화 시키는데 크게 기여하고 있다.

### 4.4. MODFLOW

지역 규모의 지하수 유동 및 오염 해석에 널리 활용되어

은 MODFLOW는 최근 PFAS 수송 모델링에서도 중요한 도구로 사용되고 있다. 본래 포화대(saturated zone) 해석을 중심으로 개발된 MODFLOW는, 이후 불포화대 유동까지 통합적으로 모의할 수 있는 비구조 격자(unstructured grid) 기반의 MODFLOW-USG로 확장되었다. 이를 기반으로 개발된 USGT-PFAS (MODFLOW-USG-Transport PFAS) 모듈은 PFAS의 복잡한 거동을 정밀하게 재현하기 위해 도입된 최신 버전으로(Hort et al., 2024), SERDP/CEDTP 프로젝트의 일환으로 GSI Environmental사(社)이 주도하여 개발되었다. 이 모듈은 PFAS의 고유한 물리·화학적 특성을 통합함으로써 기존 MODFLOW 기반 모델의 한계를 효과적으로 보완하였다.

USGT-PFAS 모듈은 Richards 방정식을 기반으로 3차원 포화-불포화 유동을 모의하고, PFAS의 이류-분산 및 지체 특성을 반영한다. HYDRUS나 MPMT 모델처럼 AWI 흡착과 비선형 흡착 과정을 구현하지만, USGT-PFAS의 가장 큰 차별성은 지역 규모의 수리동역학 해석 능력을 갖춘 MODFLOW 엔진과 대규모 불균질 지층을 정밀하게 표현할 수 있는 비구조 격자 체계를 결합했다는 점이다. 이를 통해 포화대-불포화대 경계의 연속성, 지하수위 변동 및 경우 침투 과정, 지층 이질성에 따른 AWI 면적의 시·공간적 변화를 통합적으로 모사할 수 있다.

결론적으로, MODFLOW 기반 모델은 부지(site scale) 혹은 유역 규모(watershed scale)에 이르는 복잡한 지하수 유동 시스템을 해석하는 데 강점을 지닌다. 다만 불포화대 내 미세 규모 기작의 정밀한 구현이라는 측면에서는 HYDRUS나 MPMT 기반 모델보다 단순한 접근을 취하고 있다.

4.5. 그 외 모델 및 접근법

앞서 소개한 플랫폼 외에도 PFAS 수송의 특정 메커니

즘을 규명하거나 특정 환경 조건에 최적화된 분석을 목표로 다양한 수치 모델과 프레임워크가 제안되어 왔다(Table 2). 기존의 모델 코드를 적용하거나, 맞춤형 수치 모델을 개발하는 등의 방식을 고안하였다.

McGarr et al. (2024)은 고성능 병렬 계산을 기반으로 한 오픈 소스 반응성 수송 코드인 PFLOTTRAN의 reaction sandbox 기능을 이용해 PFAS 특화 반응 모듈을 개발하고, 하천변 홍수터와 같이 지표수-지하수 상호작용이 활발한 포화-불포화 연동 환경에서 PFAS 거동을 평가하였다. Kulkarni et al. (2022)는 염소계 유기용제 오염원 및 플룸(plume) 거동 분석을 위해 개발된 REMChlor-MD 모델을 PFOS에 적용하여 매질 확산 과정을 모의하였다. Carey et al. (2025)는 MODFLOW와 반응성 수송 모델 ISR-MT3DMS를 연동하여, 해안 지역의 지구화학적 특성을 반영한 고체상 흡착 변화를 고려함으로써 PFAS의 지체 거동을 재현하였다. 마지막으로, Mahinroosta et al. (2021)은 상용 지반공학 소프트웨어인 GeoStudio 상에서 불포화 흐름 모듈(SEEP/W)과 오염물 수송 모듈(CTRAN/W)을 연동하여, 실제 오염 부지를 대상으로 수십 년 규모의 기후 영향을 평가하였다.

이밖에도 개별적인 PFAS 거동 기작의 규명을 목표로 맞춤형 수치 모델이 개발되었다. Wu et al. (2023)은 PFAS 농도에 따른 표면장력의 변화 효과를 규명하기 위한 2차원 SIF 모사 수치 모델을 구축하였다. Arshadi et al. (2024)는 MATLAB 기반 다성분 PFAS(PFOA-PFOS 혼합계) 모델을 개발하여 경쟁적 계면 흡착을 모의하고, AFFF 오염 부지 자료를 활용한 시뮬레이션을 통해 수십 년간의 기후 효과를 평가하였다.

5. PFAS 거동 모델링 연구 사례

본 절에서는 소개된 주요 모델을 활용한 최신 연구

Table 2. Summary of other numerical models and approaches applied to PFAS transport modeling.

Model	Category	Main Purpose	PFAS-related Mechanism	Developer (Reference)
PFLOTTRAN	PFAS-Extended Platforms	Transport in riparian floodplains	AWI sorption, multicomponent reactive transport	McGarr et al. (2024)
REMChlor-MD	Application on PFAS	Source and plume with matrix diffusion for an actual contaminated site	diffusion coefficient of PFOS	Kulkarni et al. (2022)
MODFLOW-MT3DMS	Application on PFAS	In situ remediation with tidal influence	Ionic strength based adsorption constant	Carey et al. (2025)
GeoStudio-CTRAN/W	Application on PFAS	Site-scale climate effects on airport contamination	Experimental-based adsorption and decay constant	Mahinroosta et al. (2021)
Custom	Custom PFAS research model	Vadose zone transport with variable surface tension	AWI, SIF effect	Wu et al. (2023)
Custom	Custom PFAS research model	Climate effects on PFOA-PFOS system	Competitive AWI adsorption	Arshadi et al. (2024)

사례를 규모 별로 정리하고, 각 연구의 목적과 특징을 비교·분석하였다.

**5.1. 공극 및 미시적 규모**

해당 규모의 모델링 연구는 실험 결과와 함께 새로운 미시적 기작을 발견하고 정량적으로 규명하는데 활용되었다.

Chen and Guo (2023)는 불포화대의 다공성 매질을 모사한 공극 네트워크 모델을 구축하여 공극 내 주요 수송 통로인 벌크 모세관수(bulk capillary water)와 얇은 수막 사이의 질량전달을 분석하였다. 이들은 MPMT 개념을 따르는 AWI 표면 확산 기작을 도입해, 표면 확산이 내부 공극(intra-pore) 영역에서의 질량전달 제한을 상당 부분 완화할 수 있음을 보였다. 반면 토양 함수비가 낮아지면 얇은 수막으로만 연결된 공극 클러스터가 형성되며, 이러한 구조적 제약이 비평형 수송을 유발하는 것으로 나타났다. Zhang and Guo (2024)는 공극 모델을 통해 얇은 수막에서 토양 표면과 AWI의 전기적 이중층(electrical double layer)이 중첩되며, 음전하를 띤 PFAS가 토양 표면과 정전기적으로 반발하여 얇은 수막 내 AWI에서의 흡착량이 벌크 AWI 대비 크게 감소할 수 있음을 규명하였다.

**5.2. 컬럼 및 실험실 규모**

컬럼 및 실험실 규모 모델링은 PFAS 수송 특성에 대한 동역학 인자를 정량화하거나, 실험 해석을 통해 결과의 타당성과 인자 범위를 검증하는 것이 주된 연구 방식으로 작용하였다. 대다수 연구에서 HYDRUS와 MPMT 모델이

활용되었다(Table 3).

Silva et al. (2020)은 HYDRUS-1D 모델을 문헌의 불포화 토양 컬럼 실험에 적용하여, AWI 흡착과 고체상 흡착의 상대적 기여도가 토양 특성에 따라 달라지는 것과 토양 이질성에 의한 구역 수분 함량과 AWI 면적 변화로 인해 PFAS 이동을 가속할 수 있음을 보였다. Stults et al. (2024)는 AFFF 오염 토양을 대상으로 불포화 컬럼 실험과 HYDRUS-1D 모의를 수행하여, 사슬 길이에 따라 PFAS의 거동에 대한 고체상 또는 AWI 흡착에 의한 영향력에 상대적 차이가 생길 수 있음을 밝혔다. Vahedian et al. (2024)은 수정된 HYDRUS-1D 모델을 적용하여 수분 변화에 따른 AWI 면적과 모세관압의 변화를 모사하여, 균질 및 층상 이질성을 가진 사질토 컬럼에서 사슬 길이에 따른 동역학적 AWI 흡착 효과의 차이를 평가하였다.

Brusseau and Guo (2021)은 MPMT 기반 모델을 통해서도 다른 AWI 면적(AWIA) 산정 방법에 따른 불포화 사질토에서의 PFOA의 거동 결과 차이를 비교하였으며, 수용상 ITT(Interfacial Tracer Test)로 산정한 AWIA를 이용하였을 경우 실험 결과와 가장 정확하게 일치함을 확인하였다. Zeng et al. (2021)은 MPMT 모델을 이용해 불포화대에서 PFAS 장기 거동에 대한 영향 인자들의 민감도와 불확실성을 평가하였으며, 잔류 기간에 대한 사슬 길이와 이온 강도의 영향력과 장쇄·고이온강도 조건에서 지체 효과 증가를 확인하였다. 또한 고체상 및 AWI 흡착의 상대적 우위에 따른 핵심 파라미터 변화, 그리고 현장 조건에서의 변화 등을 확인하였다. Huang et al. (2022)은 MPMT

**Table 3.** Summary of PFAS transport modeling studies conducted at column and laboratory scales.

Base model	Study	Model features	Findings
HYDRUS-1D	Silva et al. (2020)	Dynamic AWI area & soil heterogeneity	Dependence of sorption on soil properties; Transport acceleration by heterogeneity
	Stults et al. (2024)	Two-site non-equilibrium sorption model	Chain length-dependent transport in AFFF-contaminated soil
	Vahedian et al. (2024)	Dynamic capillary pressure based on water content	Chain length effects in homogeneous and layered sandy columns
MPMT-based	Brusseau (2021)	MPMT; Water content-dependent AWI area	Comparison of AWIA estimation methods in unsaturated sandy soil
	Zeng et al. (2021)	Richards-based transient flow; Multi-dimension	Influence of chain length and ionic strength on retention time
	Huang et al. (2022)	Multi-component PFAS mixtures	Reduced retention via competitive AWI adsorption; Mass increase via NAPL-water interface
Custom Model	Zhou et al. (2021)	Probabilistic multi-rate sorption (TOSD)	Significance of complex multi-rate kinetics beyond two-site models
	Garza-Rubalcava et al. (2025)	Extended Langmuir-Szyszkowski; Competitive sorption	Enhanced mobility due to competition in PFOA-PFOS mixtures

모델을 통해 다성분 PFAS 혼합계를 모사하여, PFOS 수송 시 공존하는 PFAS 성분의 종류가 고체상 흡착보다 AWI 흡착에 큰 영향을 미친다는 사실과 NAPL-물 계면의 영향 등을 규명하였다.

HYDRUS 및 MPMT 외에도 PFAS의 특정 수송 메커니즘을 정밀하게 포착하기 위한 독자적 모델들이 개발되어 실험실 규모 연구에 적용되었다. Zhou et al. (2021)은 포화 토양에서 PFAS의 비이상적 거동을 설명하기 위해 흡착 지점의 차이를 연속적으로 표현하는 완화형 단측 안정 분포 (tempered one-sided stable density, TOSD) 모델을 제안하였다. 해당 모델은 기존 Freundlich나 Langmuir, two-site 모델 사용 시보다 실험 결과를 정확하게 재현함으로써, PFAS 이동이 two-site 모델 이상의 정교한 다중속도 흡·탈착 과정에 의해 지배됨을 제안하였다. Garza-Rubalcava

et al. (2025)는 불포화 다공성 매질에서 모래 컬럼 실험과 MATLAB 기반 1차원 모델을 결합하여 PFOS 존재 시 PFOA의 지체가 감소하는 경쟁 효과를 정량적으로 모사하고, AWI와 다중 성분 고려에 대한 중요성을 강조하였다.

**5.3. 부지 및 현장 규모**

부지 및 현장 규모 모델링 최신 연구는 실험실에서 도출된 분배계수와 지체 인자를 장기 평형 특성으로 정리하거나, 투수계수, 포화도 분포, 지하수위 변동, 저투수층 구조 등 수리지질학적 인자의 영향을 평가하는 데 초점을 맞췄다. 대상 매질에 따라 불포화대, 불포화대-포화대 통합, 그리고 포화대로 구분하여 수행하였으며, 각각에 적합한 수치 모델을 활용하였다(Table 4).

부지 규모의 불포화대를 대상으로 하는 모델링 연구는

**Table 4.** Summary of PFAS transport modeling studies conducted at site and field scales. Studies are categorized by target environment: vadose zone, integrated vadose-saturated zone systems, and saturated zone.

Author (Year)	Media	Study Area	Model Purpose	Modeling Tool	Target Substance(s)
Silva et al. (2022)	Vadose zone	Agricultural sites in USA	Evaluating long-term source potential of biosolids and groundwater contamination under various scenarios	HYDRUS-1D	PFHxA, PFHpA, PFOA, PFNA, PFDA, PFHxS, PFOS
Arshadi et al. (2024)	Vadose zone	Three US Air Force bases	Evaluating site-specific groundwater contamination risk of PFAS at military sites under climate change	HYDRUS-1D	PFOA, PFOS, MASS (hydrocarbon surfactant)
Wallis et al. (2022)	Vadose zone	Australian Fire Training Area	Long-term prediction of groundwater contamination and comparison of physico-chemical controlling factors	LEACHM	PFOS, PFHxS, PFOA
Liao et al. (2025)	Vadose zone	Wastewater effluent-irrigated farmland in USA	Evaluating applicability of existing models and predicting long-term contaminant transport by incorporating an AWI module	PRZM5, LEACHM, HYDRUS-1D	PFOA, PFOS
Mahinroosta & Senevirathna (2021)	Vadose & Saturated zone	Australian Airport	Predicting long-term contaminant transport using climate data and comparing the effectiveness of various management scenarios.	GeoStudio	PFOS
Hort et al. (2024)	Vadose & Saturated zone	Hypothetical	Understanding PFOS retention mechanisms by integrating the AWI module and evaluating the influence of climatic and hydrogeological conditions.	MODFLOW-USG-Transport	PFOS
Zeng et al. (2024)	Vadose & saturated zone	US military fire training area	Assessing the risk of PFAS release resulting from Air-Water Interface (AWI) collapse caused by groundwater table fluctuations.	MPMT-based	PFOS, PFOA, PFPeA
Kulkarni et al. (2022)	Saturated zone (Groundwater)	US military fire training area	Evaluating the impact of matrix diffusion on PFOS plume behavior in a contaminated aquifer.	REMChlor-MD	PFOS
Farhat et al. (2022)	Saturated zone (Groundwater)	Hypothetical	Assessing the influence of matrix diffusion and hydrogeological conditions on the migration of a hypothetical PFOS groundwater plume.	REMChlor-MD	PFOS
Carey et al. (2025)	Saturated zone (Groundwater)	US coastal site	Predicting changes in PFAS adsorption capacity under high ionic strength and forecasting the effects of tidal fluctuations.	MODFLOW, ISR-MT3DMS	PFOA, PFOS
McGarr et al. (2024)	Vadose, Saturated, Hyporheic zone	Hypothetical (riparian floodplain)	Investigating the impact of physical and geochemical heterogeneity on PFOS transport in heterogeneous riparian floodplains.	PFLOTTRAN	PFOS

HYDRUS-1D, LEACHM, PRZM5와 같은 RLMs이 활용되었다. Silva et al. (2022)은 일리노이 농경지 불포화대를 대상으로 HYDRUS-1D를 이용해 7가지 PFAS 성분에 대해 지하수 오염 예측을 수행하고, 바이오솔리드의 장기 오염 원을 평가하였다. Arshadi et al. (2024)는 미 공군 기지 3곳을 대상으로 부지 특성을 반영한 모델을 통해 기후 조건 변화 시 군 부지의 PFAS의 지하수 오염 위험성 평가를 위해 HYDRUS-1D로 AFFF 혼합 성분의 거동을 모의하였다. Wallis et al. (2022)는 호주의 소방훈련장 부지에 대해 LEACHM를 활용해 AFFF 성분 누출 시 물리화학적 환경 제어 인자의 비교 및 지하수 오염 예측을 수행하였다. Liao et al. (2025)는 처리된 하수로 관개된 농경 부지에 대해 PRZM5, LEACHM, HYDRUS-1D를 통해 예측하여 기존 모델의 적용성 평가를 수행하고, AWI 모듈 사용 시 PFOA, PFOS의 장기적 오염 거동 예측 정확성에 대해 논의하였다.

불포화대-포화대 통합 시스템을 대상으로 하는 모델링 연구는 GeoStudio, MODFLOW (USGT-PFAS), MPMT 모델 등이 사용되었다. Mahinroosta and Senevirathna (2021)은 공항 부지를 대상으로 GeoStudio(SEEP/W-CTRAN/W)를 이용해 기후 작용(강우·증발산) 하에서 PFOS가 상부 토양에서 지하수로 이동하는 과정을 모의하였으며, 관리 시나리오에 따른 오염 정화 효율을 정량적으로 평가하였다. Hort et al. (2024)는 USGT-PFAS로 지하수 및 상부 불포화대에서 PFOS의 분포 상태와 수위 변동, 재충전(Recharge) 양상, 토양 입도 등의 기후 및 수리환경 조건의 영향을 평가하였다. Zeng et al. (2024)는 MPMT 기반 모델을 통해 AFFF로 오염된 불포화대-포화대 시스템을 장기 모의하여, 시간에 따른 계절적 지하수위 변동과 매질의 이질성에 의한 PFAS 오염 위험성을 정량적으로 평가하였다.

포화대 대상 연구는 REMChlor-MD, MODFLOW 모델이 활용되었다. Kulkarni et al. (2022)는 REMChlor-MD를 이용해 군 부지 인근 수백 미터 규모 대수층에서 PFOS의 거동에 대해 모의하여 매질 확산에 의한 오염원의 변화와 역확산의 장기적 영향을 규명하였다. Farhat et al. (2022)는 동일한 수치 도구를 2.5 km 규모 가상 대수층에 적용하여 PFOS 거동에 대한 수리지질 조건과 매질 확산의 영향을 분석하였다. Carey et al. (2025)는 MODFLOW와 ISR-MT3DMS를 연계해 해안 대수층에 대해 모사하여, 높은 이온 강도에 의한 PFAS 흡착량 변화와 조석에 의한 유동 역전 현상을 관찰하였다. McGarr et al. (2024)는 PFLOTTRAN을 이용하여 불균질한 하천 범람원 퇴적층을 대상으로 퇴적물 PFOS 거동에 대한 불균질성 및 지표수-지하수 경계의 영향을 평가하였다.

#### 5.4. 유역 규모

유역 규모 모델링 연구는 MODFLOW 계열 모델을 이용하여, 오염 경로 및 우선 관리 대상 구역 파악, 모니터링 설계 최적화 등의 실용적 측면의 연구가 수행되었다. Rafiei and Nejadhashemi (2023)은 SWAT-MODFLOW-RT3D를 결합한 유역 규모 PFAS 통합 수치 모델을 구축하여 불포화대에서 지하수 및 하천으로의 용탈, 지표 유출, 수평 흐름, 토사(퇴적물) 수송 경로를 정량화하고, 다양한 점·비점 오염원에서 PFOS 부하에 영향을 미치는 지형, 토양 수분 특성, 흡착 특성의 상대적 중요도를 평가하였다. McFarlan and Lemke (2024)는 MODFLOW-MODPATH를 활용한 지하수-지표수 경계를 포함한 모델링을 수행하여 유역 규모의 PFAS 거동에 대한 인공 연못에 의한 효과를 판단하였다. 결과적으로, PFAS 이동이 유역 규모의 지하수 흐름에 비해 제한적인 인공 연못의 영향과 사슬의 길이에 따른 지하수-지표면 경계 통과량의 차등 분배의 효과를 확인하였다. Ozbek et al. (2024)는 MODFLOW-SURFACT<sup>TM</sup>와 PlumeSeeker<sup>TM</sup>를 활용하여, PFOA 오염 플룸의 경계를 규명하는 데 필요한 관측점의 최소 개수와 최적 위치를 제안하고, 각 관측 지점에 따라 플룸 경계의 불확실성 감소에 기여하는 정도를 정량화하였다.

## 6. 결론 및 제언

본 논문에서는 PFAS의 지중 환경 내 수송 메커니즘과 수치 모델링 연구의 국제 동향을 종합적으로 분석하였다. PFAS 수송 모델링은 평형 기반 단순 흡착 모델에서 비평형 고체상 흡착, AWI 흡착, 경쟁 흡착 등을 통합 고려하는 다중 프로세스 모델로 발전하였으며, 특히 불포화대에서 AWI 흡착과 수분 조건 변화에 따른 동적 거동 반영이 필수적임을 확인하였다.

주요 수치 모델의 특성을 비교한 결과, HYDRUS는 기존의 검증된 수문학적 유체 흐름 해석 플랫폼에 PFAS 특화 AWI 모듈의 수리동역학 해석을 더해 복잡한 수문학적 조건에서 정교한 수치 계산이 가능하며, MPMT 기반 모델은 연구진의 PFAS 거동에 대한 깊은 이론적·실험적 이해를 바탕으로 새로운 기작을 규명하고 PFAS 모델의 지배 방정식을 발전시키는데 가장 큰 기여를 하고 있다. MODFLOW 기반 모델은 부지 및 유역 규모의 포괄적인 지하수 유동 시스템 해석에 적합하다.

규모별 모델링 연구를 분석한 결과, PFAS 수송 지배 인자는 규모에 따라 뚜렷하게 달라졌다. 공공 규모에서는 얇은 수막 내 질량전달 제한 및 전기적 이중층 효과, 실험실

규모에서는 비평형 흡·탈착 동역학과 경쟁 흡착, 현장 규모에서는 분배계수와 수리지질학적 특성이 주요 제어 인자로 작용하였다. 유역 규모에서는 오염원의 공간적 분포와 지표수-지하수 상호작용을 고려한 통합 접근이 가능했다. 본 연구에서는 PFAS 거동 해석을 위한 규모별 적용 가능한 도구를 소개하고 흐름을 제시하는 데 초점을 두었으나, 향후 연구에서는 다양한 규모별 매개변수 범위 및 모델 예측 오차율에 대한 정량적 해석을 토대로 통계적인 고찰이 요구된다.

국내 PFAS 연구는 처리 기술, 독성 평가, 실태조사 중심으로 진행되어 지중 수송 기작과 모델링 연구는 초기 단계에 머물러 있다. 향후 국내 PFAS 오염 문제에 효과적으로 대응하기 위해서는 국내 토양 및 지질 조건에 적합한 수송 매개변수 데이터베이스 구축, 주요 오염원별 특성을 반영한 부지 규모 모델링 연구, 실험실 규모 매개변수의 현장 및 유역 규모 확장 방법론 개발 등의 연구 논의가 요구된다. 본 논문에서 정리한 PFAS 수송 기작과 모델링 방법론이 국내 연구 발전의 기술적 기반으로 활용되기를 기대한다.

## References

- AECOM, 2020. Review of available software for PFAS modeling within the vadose zone, AECOM, Grand Rapids, MI.
- Ankley, G.T. et al., 2021. Assessing the ecological risks of per- and polyfluoroalkyl substances: Current state-of-the science and a proposed path forward. *Environmental Toxicology and Chemistry*, **40**(3), 564-605.
- Arshadi, M. et al., 2024. Modeling 1-D aqueous film forming foam transport through the vadose zone under realistic site and release conditions. *Sci. Total Environ.*, **919**, 170566. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.170566>
- Bhatarai, B., and Gramatica, P., 2011. Prediction of aqueous solubility, vapor pressure and critical micelle concentration for aquatic partitioning of perfluorinated chemicals. *Environ. Sci. Technol.*, **45**(19), 8120-8128. DOI: [10.1021/es101181g](https://doi.org/10.1021/es101181g)
- Brusseau, M.L., 2020. Simulating PFAS transport influenced by rate-limited multi-process retention. *Water Res.*, **168**, 115179. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2019.115179>
- Brusseau, M.L., Guo, B., 2021. Air-water interfacial areas relevant for transport of per and poly-fluoroalkyl substances. *Water Res.*, **207**, 117785. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117785>
- Brusseau, M.L., Guo, B., Huang, D., Yan, N., and Lyu, Y., 2021. Ideal versus nonideal transport of PFAS in unsaturated porous Media. *Water Res.*, **202**, 117405. DOI: [10.1016/j.watres.2021.117405](https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117405)
- Brusseau, M.L. et al., 2019a. Nonideal transport and extended elution tailing of PFOS in soil. *Environ. Sci. Technol.*, **53**(18), 10654-10664. DOI: [10.1021/acs.est.9b02343](https://doi.org/10.1021/acs.est.9b02343)
- Brusseau, M.L., and Van Glubt, S., 2019. The influence of surfactant and solution composition on PFAS adsorption at fluid-fluid interfaces. *Water Res.*, **161**, 17-26. DOI: [10.1016/j.watres.2019.05.095](https://doi.org/10.1016/j.watres.2019.05.095)
- Brusseau, M.L. et al., 2019b. Comprehensive retention model for PFAS transport in subsurface systems. *Water Res.*, **148**, 41-50. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.10.035>
- Cameron, D., and Klute, A., 1977. Convective-dispersive solute transport with a combined equilibrium and kinetic adsorption model. *Water Resour. Res.*, **13**(1), 183-188.
- Carey, G.R. et al., 2025. Modeling the influence of coastal site characteristics on PFAS in situ remediation. *Groundwater*, **63**(2), 175-191. DOI: <https://doi.org/10.1111/gwat.13456>
- Chen, S., and Guo, B., 2023. Pore-scale modeling of PFAS transport in water-unsaturated porous media: Air-water interfacial adsorption and mass-transfer processes in thin water films. *Water Resour. Res.*, **59**(8), e2023WR034664. DOI: <https://doi.org/10.1029/2023WR034664>
- Cho, N., 2025. 과불화화합물(PFAS) 규제 동향 및 대응전략, KISTEP 성장동력사업센터.
- ECCC, 2025. State of Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) report. Environment and Climate Change Canada, QC, Canada.
- Farhat, S.K., Newell, C.J., Lee, S.A., Looney, B.B., and Falta, R.W., 2022. Impact of matrix diffusion on the migration of groundwater plumes for Perfluoroalkyl acids (PFAAs) and other non-degradable compounds. *J. Contam. Hydrol.*, **247**, 103987. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2022.103987>
- Fenton, S.E. et al., 2021. Per- and polyfluoroalkyl substance toxicity and human health review: Current state of knowledge and strategies for informing future research. *Environmental Toxicology and Chemistry*, **40**(3), 606-630.
- Garza-Rubalcava, U., Klevan, C., Pennell, K.D., and Abriola, L.M., 2025. Transport and competitive interfacial adsorption of PFOA and PFOS in unsaturated porous media: Experiments and modeling. *Water Res.*, **268**, 122728. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.122728>
- Gassmann, M., 2021. Modelling the fate of pesticide transformation products from plot to catchment scale—state of knowledge and future challenges. *Front. Environ. Sci.*, **9**. DOI: [10.3389/fenvs.2021.717738](https://doi.org/10.3389/fenvs.2021.717738)
- Guo, B., and Brusseau, M.L., 2024. Challenges and opportunities for porous media research to address PFAS groundwater

- contamination. *InterPore J.*, **1**(2), ipj240824-2. DOI: 10.69631/ipj.v1i2nr35
- Guo, B., Saleem, H., and Brusseau, M.L., 2023. Predicting interfacial tension and adsorption at fluid–fluid interfaces for mixtures of PFAS and/or hydrocarbon surfactants. *Environ. Sci. Technol.*, **57**(21), 8044-8052. DOI: 10.1021/acs.est.2c08601
- Guo, B., Zeng, J., and Brusseau, M.L., 2020. A mathematical model for the release, transport, and retention of Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in the Vadose Zone. *Water Resour. Res.*, **56**(2), e2019WR026667. DOI: <https://doi.org/10.1029/2019WR026667>
- HEPA, 2025. PFAS national environmental management Plan Version 3.0. department of climate Change, Energy, the Environment and Water, Canberra, ACT, Australia.
- Higgins, C.P., and Luthy, R.G., 2006. Sorption of Perfluorinated Surfactants on Sediments. *Environ. Sci. Technol.*, **40**(23), 7251-7256. DOI:10.1021/es061000n
- Hort, H.M., Stockwell, E.B., Newell, C.J., Scalia, J., and Panday, S., 2024. Modeling and evaluation of PFOS retention in the unsaturated zone above the water table. *Groundw. Monit. Remediat.*, **44**(3), 38-48. DOI:10.1111/gwmmr.12662
- Huang, D., Saleem, H., Guo, B., and Brusseau, M.L., 2022. The impact of multiple-component PFAS solutions on fluid–fluid interfacial adsorption and transport of PFOS in unsaturated porous media. *Sci. Total Environ.*, **806**, 150595. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.150595>
- Kolade, S.O. et al., 2026. Multi-compound PFAS transport in the unsaturated zone during infiltration cycles. *Water Res.*, **288**, 124463. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2025.124463>
- Kulkarni, P.R., Adamson, D.T., Popovic, J., and Newell, C.J., 2022. Modeling a well-characterized perfluorooctane sulfonate (PFOS) source and plume using the REMChlor-MD model to account for matrix diffusion. *J. Contam. Hydrol.*, **247**, 103986. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2022.103986>
- Lagergren, S., 1898. About the theory of so-called adsorption of soluble substances.
- Lee, I.J., Yoon, W.H., Jeong, G., and Cho, S.-J., 2024. Distribution and risk assessment of perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in the South Han River. *J. Environ. Anal. Health Toxicol.*, **27**(1), 29-38.
- Li, H. et al., 2023. Transport behavior difference and transport model of long- and short-chain per- and polyfluoroalkyl substances in underground environmental media: A review. *Environ. Pollut.*, **327**, 121579. DOI: 10.1016/j.envpol.2023.121579
- Liao, S. et al., 2025. Simulating PFAS transport in effluent-irrigated farmland using PRZM5, LEACHM, and HYDRUS-1D models. *J. Environ. Qual.*, **54**(1), 54-65. DOI: <https://doi.org/10.1002/jeq2.20639>
- Lyu, X. et al., 2022. Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in subsurface environments: Occurrence, fate, transport, and research prospect. *Rev. Geophys.*, **60**(3). DOI: 10.1029/2021rg000765
- Lyu, Y. et al., 2018. Adsorption of PFOA at the Air-Water interface during transport in unsaturated porous Media. *Environ. Sci. Technol.*, **52**(14), 7745-7753. DOI: 10.1021/acs.est.8b02348
- Mahinroosta, R., and Senevirathna, L., 2021. The effectiveness of PFAS management options on groundwater quality in contaminated land using numerical modelling. *Chemosphere*, **279**, 130528. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130528>
- Mahinroosta, R., Senevirathna, L., Li, M., and Krishna Pillai, K., 2021. A methodology for transport modelling of a contaminated site with perfluorooctane sulfonate due to climate interaction. *Process Saf. Environ. Prot.*, **147**, 642-653. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2020.12.034>
- Martínez-Balbuena, L., Arteaga-Jiménez, A., Hernández-Zapata, E., and Márquez-Beltrán, C., 2017. Applicability of the Gibbs Adsorption Isotherm to the analysis of experimental surface-tension data for ionic and nonionic surfactants. *Adv. Colloid Interface Sci.*, **247**, 178-184. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cis.2017.07.018>
- McFarlan, E.L., and Lemke, L.D., 2024. Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) fate and transport across a groundwater-surface water interface. *Sci. Total Environ.*, **951**, 175672. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.175672>
- McGarr, J.T. et al., 2024. Fate and transport of perfluorooctane sulfonic acid (PFOS) within heterogenous riparian floodplains. *Sci. Total Environ.*, **957**, 177496. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.177496>
- Ozbek, M., Voorhies, N., Howard, L., Swanson, R., and Fox, T., 2024. Delineation of a PFOA plume and assessment of data gaps in its conceptual model using PlumeSeeker™. *Groundwater*, **62**(1), 44-59. DOI: <https://doi.org/10.1111/gwat.13373>
- Park, S. et al., 2025. A study on domestic and international management trends and treatment methods of PFAS in groundwater. *J. Soil Groundw. Environ.*, **30**(3), 1-13.
- Pemberton, E., 2021. Poly- and perfluoroalkyl substances (PFAS): sources, pathways and environmental data, Environment Agency, Bristol, UK.
- Rafiei, V., and Nejadhashemi, A.P., 2023. Watershed scale PFAS fate and transport model for source identification and management implications. *Water Res.*, **240**, 120073. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2023.120073>
- Schaefer, C.E., Drennan, D., Nickerson, A., Maizel, A., and Higgins, C.P., 2021. Diffusion of perfluoroalkyl acids through clay-rich soil. *J. Contam. Hydrol.*, **241**, 103814. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2021.103814>
- Sharma, N. et al., 2024. A comprehensive review on the need

- for integrated strategies and process modifications for per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) removal: Current insights and future prospects. *Case Stud. Chem. Environ. Eng.*, **9**. DOI: 10.1016/j.cscee.2024.100623
- Silva, J.A.K., Guelfo, J.L., Šimůnek, J., and McCray, J.E., 2022. Simulated leaching of PFAS from land-applied municipal biosolids at agricultural sites. *J. Contam. Hydrol.*, **251**, 104089. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2022.104089>
- Silva, J.A.K., Martin, W.A., and McCray, J.E., 2021. Air-water interfacial adsorption coefficients for PFAS when present as a multi-component mixture. *J. Contam. Hydrol.*, **236**, 103731. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2020.103731
- Silva, J.A.K., Šimůnek, J., and McCray, J.E., 2020. A modified HYDRUS model for simulating PFAS transport in the vadose zone. *Water*, **12**(10), 2758.
- Sima, M.W., and Jaffe, P.R., 2021. A critical review of modeling Poly- and Perfluoroalkyl Substances (PFAS) in the soil-water environment. *Sci. Total Environ.*, **757**, 143793. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2020.143793
- Šimůnek, J., Brunetti, G., Jacques, D., van Genuchten, M.T., and Šejna, M., 2024. Developments and applications of the HYDRUS computer software packages since 2016. *Vadose Zone J.*, **23**(4), e20310. DOI: <https://doi.org/10.1002/vzj2.20310>
- Sookhak Lari, K. et al., 2024. The dynamics of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) at interfaces in porous Media: A Computational Roadmap from Nanoscale Molecular Dynamics Simulation to Macroscale Modeling. *ACS Omega*, **9**(5), 5193-5202. DOI: 10.1021/acsomega.3c09201
- Stults, J.F. et al., 2024. Air-water interfacial collapse and rate-limited solid desorption control Perfluoroalkyl acid leaching from the vadose zone. *J. Contam. Hydrol.*, **265**, 104382. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2024.104382>
- U.S. DoD, 2022. Summary report: Strategic workshop on management of PFAS in the environment. strategic environmental research and development program (SERDP) / Environmental Security Technology Certification Program (ESTCP), Arlington, VA.
- U.S. EPA, 2024. EPA's PFAS Strategic roadmap: Three years of progress. U.S. Environmental Protection Agency (EPA), Washington, DC, pp. 16.
- US EPA, 2024. EPA's PFAS Strategic roadmap: Three years of progress. In: Agency, U.S.E.P. (Ed.). US EPA.
- Vahedian, F., Silva, J.A.K., Šimůnek, J., and McCray, J.E., 2024. Influence of kinetic air-water interfacial partitioning on unsaturated transport of PFAS in sandy soils. *Sci. Total Environ.*, **957**, 177420. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.177420>
- Wallis, I. et al., 2022. Model-based identification of vadose zone controls on PFAS mobility under semi-arid climate conditions. *Water Res.*, **225**, 119096. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.119096>
- Wu, R., Li, X., Sun, Y., Szymczak, P., and Jiao, W., 2023. Second-order accurate implicit finite volume method for two-dimensional modeling of PFAS transport in unsaturated porous media with variable surface tension. *Adv. Water Resour.*, **178**, 104490. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2023.104490>
- Xing, Y. et al., 2021. Different transport behaviors and mechanisms of perfluorooctanoate (PFOA) and perfluorooctane sulfonate (PFOS) in saturated porous media. *J. Hazard. Mater.*, **402**, 123435. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2020.123435
- Zeng, J., Brusseau, M.L., and Guo, B., 2021. Model validation and analyses of parameter sensitivity and uncertainty for modeling long-term retention and leaching of PFAS in the vadose zone. *J. Hydrol.*, **603**, 127172. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2021.127172>
- Zeng, J., Brusseau, M.L., and Guo, B., 2024. Modeling PFAS subsurface transport in the presence of groundwater table fluctuations: The impact on source-zone leaching and exploration of model simplifications. *Water Resour. Res.*, **60**(11), e2024WR037707. DOI: <https://doi.org/10.1029/2024WR037707>
- Zeng, J., and Guo, B., 2021. Multidimensional simulation of PFAS transport and leaching in the vadose zone: Impact of surfactant-induced flow and subsurface heterogeneities. *Adv. Water Resour.*, **155**, 104015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2021.104015>
- Zhang, W., and Guo, B., 2024. Anomalous adsorption of PFAS at the Thin-Water-Film Air-Water Interface in Water-Unsaturated Porous Media. *Water Resour. Res.*, **60**(3), e2023WR035775. DOI: <https://doi.org/10.1029/2023WR035775>
- Zhou, D. et al., 2021. Simulating PFAS adsorption kinetics, adsorption isotherms, and nonideal transport in saturated soil with tempered one-sided stable density (TOSD) based models. *J. Hazard. Mater.*, **411**, 125169. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.125169>