

Marcin Konrad Widomski, Beata Kowalska, Dariusz Kowalski

Badania modelowe rozprzestrzeniania się butylohydroksytoluenu (BHT) migrującego z rur polietylenowych (PE-HD) do wody

W związku z coraz powszechniejszym stosowaniem rur z PE-HD do budowy sieci i instalacji wodociągowych wzrasta możliwość przedostawania się do wody substancji migrujących z materiału rur. Są to głównie związki małowcząsteczkowe, wprowadzane do polimeru podczas syntezy i przetwórstwa oraz produkty ich rozkładu, a także produkty rozkładu samego polimeru. Wśród rozpoznanych substancji migrujących ze ścianek przewodów polietylenowych do wody wodociągowej, wpływających zarazem na jej jakość, są m.in. przeciwutleniacze (Irganox 1010, Irganox 1035, Irganox 1076, 2,6-di-*tert*-butylo-4-metylofenol – BHT) i produkty ich rozkładu (4-etylofenol, 4-*t*-butylofenol, 2,6-di-*t*-butyl-*p*-benzochinon, 2,4-di-*t*-butylofenol, 3,5-di-*t*-butyl-4-hydroksystyren, 3,5-di-*t*-butyl-4-acetofenon, 3,5-di-*t*-butyl-4-hydroksyacetofenon), estry (octan butylu, heksanian etylu, heksanian propylu, heksanian butylu, octan heksylu, oktanian etylu, 2,2,4-trimetylopentano-1,3-diol), aldehydy (nonanal, dekanal) oraz ketony (2-dekanon, 2-undekanon, 2-dodekanon) [1–9]. Migracja stabilizatorów i innych substancji w rurach polietylenowych rozpoczyna się w matrycy polimerowej, przebiegając w kierunku powierzchni kontaktującej się z wodą [10]. Zależy ona od rodzaju i właściwości składnika migrującego oraz od temperatury. Składnik migruje poprzez wolne przestrzenie (pustki) znajdujące się między makrocząsteczkami polimeru. Z tego względu szybkość migracji zależy od rozmiaru i kształtu migrujących cząsteczek oraz od rozmiaru i liczby pustek [11]. Termodynamiczne właściwości polimeru, takie jak polarność i rozpuszczalność, także wpływają na szybkość migracji. Migrujące związki mogą powodować pogorszenie jej smaku i zapachu. Wymywanie przeciwutleniaczy ma także wpływ na właściwości mechaniczne rur, szczególnie na ich wytrzymałość długoczasową. Migrujące z rur związki organiczne mogą być także pożywką dla mikroorganizmów i powodować ich rozwój. Wszystkie materiały stosowane obecnie w wodociągach są podatne na osadzanie się mikroorganizmów na powierzchni wewnętrznej rur i formowanie biofilmu [12], który uznaje się za kluczowe źródło bakterii w wodzie wodociągowej [13].

Jednym z najbardziej popularnych przeciwutleniaczy, uwalnianym z tworzyw polimerowych, jest butyloowany hydroksytoluen (butylohydroksytoluen – BHT). Związek

ten jest rozpuszczalnym w tłuszczach przeciwutleniaczem, znajdującym szerokie zastosowanie w przemysłach polimerowym, paliwowym, spożywczym oraz farmaceutycznym [14]. Temperatura topnienia BHT wynosi około 70 °C, rozpuszczalność w wodzie 0,6÷1,1 g/m³ (w temp. 20÷25 °C), a jego gęstość 1,03 g/cm³. Według Dyrektywy 67/548/EWG, w sprawie klasyfikacji niebezpiecznych substancji chemicznych, BHT jest związkiem łatwopalnym, toksycznym i drażniącym. Związek ten jest uznawany za bezpieczny w użyciu, jeżeli zawartość przeciwutleniacza w żywności nie przekracza 0,02% całkowitej zawartości tłuszczów i olejów [14]. BHT jest stosowany także w celu poprawy stabilności środków farmakologicznych, witamin rozpuszczalnych w tłuszczach i kosmetyków [15]. Dodatek BHT do tworzyw sztucznych zapobiega rozkładowi polimeru w czasie jego przetwarzania oraz wydłuża czas użytkowania gotowych wyrobów [16]. Przykładowo, dodatek BHT do poliolefin, mający na celu zapobieżenie degradacji polimeru, jest stosowany w ilości do 500 mg/kg [14].

W związku z szybkim rozwojem technik numerycznych oraz coraz większą dostępnością odpowiedniego oprogramowania, modelowanie zmian jakości wody w przewodach wodociągowych zyskuje coraz większą popularność. Modelowanie takie ułatwia analizę rozprzestrzeniania się i rozkładu zanieczyszczeń w wodzie, wspomagając właściwe projektowanie i zarządzanie siecią wodociągową [17–23]. Szczególną uwagę, jak dotychczas, położono na modelowanie rozprzestrzeniania się chloru, jako podstawowego środka dezynfekcyjnego [16, 24–26]. Metody obliczeniowe dynamiki płynów (CFD – computational fluid dynamics) umożliwiają obliczenia rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w przewodach wodociągowych w różnych warunkach przepływu, z uwzględnieniem reakcji chemicznych zachodzących w wodzie i na ściankach przewodów, a także ich kinetyki [5, 27]. Jednym z najpopularniejszych komercyjnych programów z grupy CFD, o szerokich możliwościach obliczeniowych, jest program Fluent, Ansys Inc. [28–30]. Zastosowany w tym programie opis matematyczny ruchu wody oparty jest na równaniach zachowania masy, zachowania pędu i momentu pędu oraz Naviera-Stokesa [31, 32]. Równania te, wraz z przyjętymi warunkami brzegowymi, umożliwiają modelowanie przepływu płynów (także układów wielofazowych) w ruchu laminarnym i turbulentnym, w warunkach ustalonych i nieustalonych. Obliczenia jakościowe, obejmujące transport, mieszanie oraz rozpad (reagujących lub nie z pozostałymi składnikami mieszaniny) związków chemicznych w wodzie, są oparte na równaniach zachowania masy danego składnika mieszaniny w postaci [33]:

Dr inż. M.K. Widomski: Politechnika Lubelska, Wydział Inżynierii Środowiska, Zakład Gospodarki Wodnej, ul. Nadbystrzycka 40B, 20-618 Lublin m.widomski@wis.pol.lublin.pl

Dr hab. inż. B. Kowalska, dr hab. inż. D. Kowalski: Politechnika Lubelska, Wydział Inżynierii Środowiska, Zakład Wodociągów i Kanalizacji, ul. Nadbystrzycka 40B, 20-618 Lublin

b.kowalska@pollub.pl, d.kowalski@wis.pol.lublin.pl

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla(\rho \vec{u} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (1)$$

w której:

Y_i – lokalny ułamek masowy i-tego składnika

\vec{J}_i – wektor przepływu dyfuzyjnego i-tego składnika

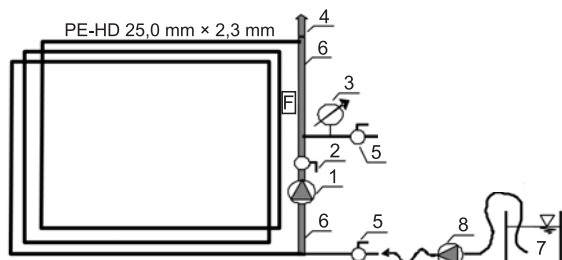
R_i – produkcja i-tego składnika przez reakcje chemiczne

S_i – powstawanie i-tego składnika poprzez przejście z fazy rozproszonej lub z innego źródła

W niniejszej pracy zawarto wyniki rozpoznawczych pomiarów i obliczeń modelowych rozprzestrzeniania się wybranego zanieczyszczenia (BHT) migrującego do wody z rury PE-HD w zamkniętym układzie laboratoryjnym.

Materiały i metody

Do budowy stanowiska pomiarowego (rys. 1) wykorzystano nową rurę z PE-HD 80 o średnicy 25 mm i długości 30 m. Podstawowe właściwości PE-HD podane przez producenta były następujące: gęstość 955 kg/m^3 , moduł Younga 700 MPa , wskaźnik szybkości płynięcia (MFI) $0,65 \text{ g/10 min}$, zawartość związków lotnych $0,2\%$, udarność (met. Charpy'ego) $14,5 \text{ MJ/mm}^2$. Objętość wody w układzie pomiarowym wynosiła $9,806 \text{ dm}^3$. Przed przystąpieniem do badań stanowisko zostało przepłukane wodą zdejonizowaną, uzyskaną za pomocą urządzenia Milli-Q (Millipore, Molsheim, Germany), z prędkością przepływu $1,0 \text{ m/s}$, w taki sposób, aby zapewnić co najmniej trzykrotną wymianę wody w układzie. Następnie stanowisko zostało wypełnione wodą z tego samego źródła, a stała prędkość przepływu wody w układzie, wynosząca $0,6 \text{ m/s}$ ($Re=10200$ przy prędkości średniej) była utrzymywana za pomocą pompy (1). Podstawowe wskaźniki wody zdejonizowanej wykorzystanej do płukania, a następnie napełnienia układu były następujące: ogólny węgiel organiczny $\leq 0,5 \text{ mgC/m}^3$, oporność właściwa $18,2 \text{ M}\Omega\text{cm}$. Próbkę wody do badań jakościowych pobrano z układu do szklanych butelek o pojemności $0,5 \text{ dm}^3$ w następujących odstępach czasu: 4 h, 12 h, 24 h, 48 h oraz 72 h. Ubytek wody w układzie był uzupełniany ze zbiornika (7).



Rys. 1. Schemat stanowiska pomiarowego (1 – pompa obiegowa, 2 – zawór dławiący, 3 – manometr ($0 \pm 0,25 \text{ MPa}$), 4 – odpowietrznik, 5 – zawór, 6 – rura stalowa (śr. 20 mm , dł. $1,0 \text{ m}$), 7 – zbiornik wody do napełniania instalacji, 8 – pompa do napełniania instalacji, F – przenośny przepływomierz ultradźwiękowy)

Fig. 1. Flow diagram of the laboratory setup (1 = pump, 2 = valve, 3 = manometer ($0-0.25 \text{ MPa}$), 4 = brass vent valve, 5 = valve, 6 = steel pipe (diameter, 20 mm ; length, 1.0 m), 7 = tank containing water for filling the setup, 8 = pump for filling the setup, F = portable ultrasonic flow meter)

Badania zawartości BHT w próbkach wody pobranych ze stanowiska pomiarowego, zgodnie z przyjętym harmonogramem, zostały wykonane za pomocą wielokanałowego chromatografu gazowego Trace Ultra Thermo sprzężonego ze spektrometrem mas Polaris Q. Próbkę wody (40 cm^3) były umieszczone w fiolkach o pojemności 60 cm^3 z przegrodą (silicon/PTFE – Supelco, Bellefonte, USA) i termostatowane w temperaturze 30°C . Zastosowano mikroekstrakcję do fazy stacjonarnej (SPME) na włóknie kwarcowym pokrytym polidimetylosiloksanem PDMS (Supelco, Bellefonte, USA) o grubości $100 \mu\text{m}$. Następnie włókna były natychmiast przenoszone do dozownika chromatografu i w temperaturze 270°C pozostawione na 10 min w celu desorpcji. Warunki pracy urządzenia były następujące: Trace Ultra Thermo – dozownik: PTV, tryb stałotemperaturowy, bez podziału strumienia (splitless), temperatura 270°C , kolumna kapilarna DB-5 (dł. 60 m , śr. wewn. $0,25 \text{ mm}$), grubość fazy stacjonarnej $0,25 \mu\text{m}$ (95% dimetylo- 5% difenylopolisiloksan); programowanie temperatury pieca: 75°C (2 min), przyrost 5°C/min do 270°C , gaz nośny He ($99,9996\%$) przy stałej prędkości przepływu 40 cm/s ; Polaris Q – Thermo: temperatura źródła jonów 250°C , temperatura linii transferowej 275°C , monitoring wszystkich jonów w zakresie od $50,0 \text{ U}$ do $370,0 \text{ U}$.

Obliczenia symulacyjne

Model numeryczny rozprzestrzeniania się BHT w badanej wodzie, przemieszczającej się ze stałą prędkością średnią w układzie badawczym, wykonano z zastosowaniem metody elementów skończonych, za pomocą komercyjnego programu Fluent 6.3, stanowiącego część pakietu obliczeniowego Ansys 12.1 (Ansys Inc.) Obszar obliczeniowy odzwierciedlający objętość wody wypełniającej układ badawczy składał się z 537959 elementów skończonych i 634968 węzłów. Model nie zawierał pompy obiegowej – ruch wody w modelu ze stałą prędkością uzyskano przez nadanie stałej prędkości przepływu wybranej, niewielkiej objętości kontrolnej. Czas przeprowadzonej symulacji wynosił 72 h . Przyjęte do obliczeń dane wejściowe zostały przedstawione w tabeli 1. Obliczenia przepływu nieściśliwej cieczy lepkiej przez układ badawczy oparto na standardowym dwurównaniowym modelu turbulencji $k-\epsilon$, (k – energia kinetyczna turbulencji, ϵ – dysypacja energii kinetycznej turbulencji) [34, 35]. Przyjętą do obliczeń wartość współczynnika dyfuzji BHT w wodzie wyznaczono na podstawie własnych obliczeń bazujących na przeprowadzonych pomiarach laboratoryjnych oraz standardowej postaci prawa Ficka [36]. W obliczeniach migracji i rozprzestrzeniania się BHT zastosowano warunek brzegowy pierwszego rodzaju o stałej (niezmiennej w czasie) zawartości BHT w warstwie przyściennej, ustalonej metodą prób i błędów w oparciu o przeprowadzone pomiary laboratoryjne. W zastosowanym modelu nie opisano reakcji rozkładu BHT w wodzie. Obliczenia modelowe przeprowadzono na podstawie przyrostu zawartości BHT, przyjmując zawartość początkową równą zero.

Tabela 1. Dane wejściowe do obliczeń symulacyjnych
Table 1. Input data for numerical modeling

Ruch wody		Transport BHT	
Średnia prędkość przepływu	$0,6 \text{ m/s}$	Masa molowa	$220,3505 \text{ g/mol}$
Temperatura	288 K	Współczynnik dyfuzji	$1,337\text{e-}15 \text{ m}^2/\text{s}$
Współczynnik lepkości dynamicznej	$0,001308 \text{ Pa}\cdot\text{s}$	Warunek brzegowy Dirichleta, ułamek masowy	$2,5392\text{e-}12$

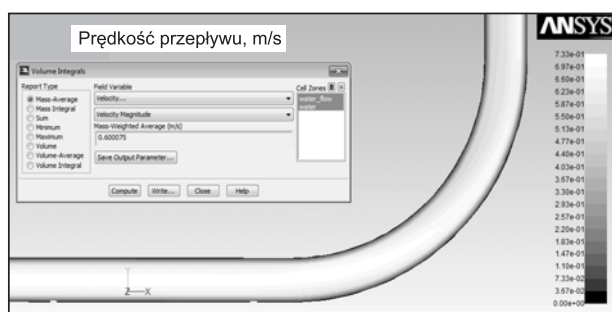
Tabela 2. Zawartość BHT w wodzie wypełniającej układ badawczy
Table 2. BHT concentration in the water filling the laboratory setup

Wskaźnik, jednostka	Czas, h					
	0	4	12	24	48	74
Zawartość BHT, mg/m ³	0,00e+0	2,70e-4	3,58e-4	2,74e-4	3,02e-4	3,00e-4
Odchylenie standardowe, mg/m ³	0,00e+0	1,30e-5	2,03e-5	2,14e-5	1,99e-5	1,83e-5

Dyskusja wyników

Wyniki pomiarów ilości BHT migrującego z rury wodociągowej PE-HD do wody wypełniającej stanowisko badawcze przedstawiono w tabeli 2. Maksymalna zaobserwowana w czasie badań zawartość analizowanego związku wyniosła $3,58e-4$ mg/m³ po 12 h od uruchomienia układu badawczego, a następnie odnotowano zmniejszenie jego zawartości do $2,74e-4$ mg/m³. Całkowity pomierzony przyrost zawartości BHT po 72 h od rozpoczęcia pomiarów wyniósł $3,00e-4$ mg/m³.

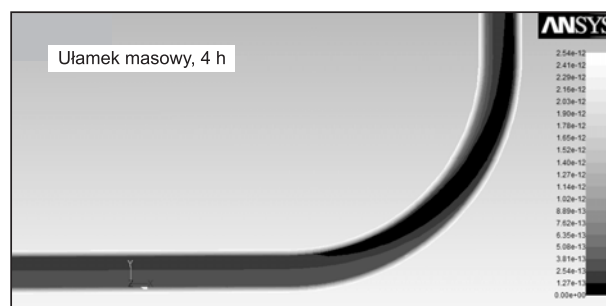
Wyniki przeprowadzonych obliczeń numerycznych obejmowały rozkład oraz średnie wartości przyrostu ilości BHT w układzie badawczym, bezpośrednio powiązane z właściwościami hydraulicznymi przepływającego strumienia wody. Na rysunku 2 przedstawiono obliczony rozkład prędkości w ruchu turbulentnym – uzyskano widoczną zgodność prędkości średniej z prędkością przepływu w układzie laboratoryjnym.



Rys. 2. Rozkład prędkości przepływu wody na łuku stanowiska badawczego

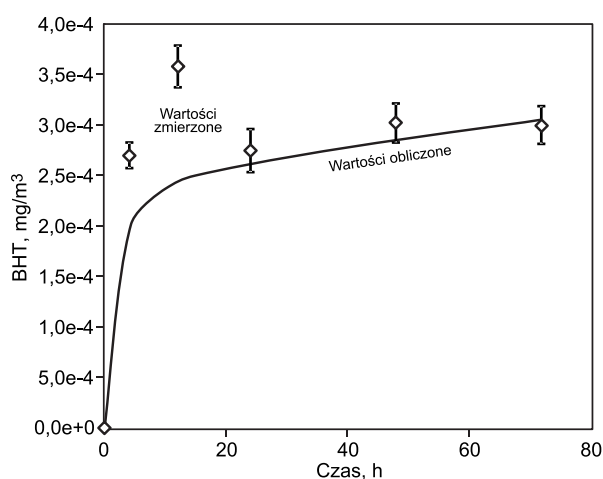
Fig. 2. Distribution of water flow velocity in the laboratory setup

Przykładowe wyniki obliczeń numerycznych migracji i rozprzestrzeniania się BHT w objętości wody wypełniającej układ badawczy, przy założeniu kroków czasowych odpowiadających pomiarom laboratoryjnym – 4 h, 24 h i 72 h, przedstawiono na rysunku 3. Zawartość BHT w wodzie ponad to została przedstawiona za pomocą ułamka masowego wyrażającego stosunek masy danego związku do masy wody w układzie laboratoryjnym. Na wykresie przedstawiającym wyniki obliczeń symulacyjnych po 4 h widoczne było wyraźne przestrzenne zróżnicowanie ilości BHT w strumieniu, w zależności od odległości od osi przewodu. Największa zawartość migrującej substancji wystąpiła w warstwie przyściennej, a najmniejsza w osi przewodu. Wyniki obliczeń przyrostu ilości BHT po 24 h wykazały niepełne wymieszanie migrującego BHT w strumieniu wody przepływającej przewodem badawczym. W czasie trwania obliczeń symulacyjnych nie zaobserwowano pełnego wymieszania modelowanej substancji w strumieniu wody przepływającej przez układ po 72 h trwania obliczeń symulacyjnych. Obliczona zawartość BHT w wodzie przepływającej poprzez stanowisko badawcze w układzie zamkniętym zwiększyła się gwałtownie w ciągu pierwszych

Rys. 3. Przyrost ilości BHT w wodzie po czasie 4 h, 24 h i 72 h
Fig. 3. Increment in the BHT content of the water after 4 hr, 24 hr and 72 hr

12 h symulacji od zera do $2,406e-4$ mg/m³, po czym nastąpił stopniowy przyrost ilości BHT w czasie od 24 h do 72 h od $2,585e-4$ mg/m³ do $3,062e-4$ mg/m³.

Rysunek 4 zawiera zestawienie pomierzonych oraz obliczonych za pomocą modelu numerycznego zawartości BHT w wodzie wypełniającej stanowisko badawcze. Stwierdzono stosunkowo dużą zgodność między wynikami pomiarów laboratoryjnych a wynikami obliczeń numerycznych. Wartość błędnej względnej przy czasie trwania eksperymentu 72 h wyniosła 2,1%. Wyznaczony w obu seriach wyników współczynnik korelacji wyniósł 0,9199. Najistotniejsze różnice zaobserwowano w czasie około 12 h od rozpoczęcia badań laboratoryjnych i obliczeń symulacyjnych. Widoczny był (niewystępujący w obliczeniach modelowych) wzrost, a następnie spadek zawartości BHT w układzie badawczym. Zaobserwowana maksymalna różnica pomiędzy wartością pomierzoną a wartością obliczoną wyniosła (przy czasie 12 h) 27,9% wartości pomierzonej.



Rys. 4. Porównanie wyników pomiarów i obliczeń numerycznych zawartości BHT w układzie badawczym

Fig. 4. Measured and calculated BHT content of the water in the laboratory setup

Wnioski

◆ Wyniki badań laboratoryjnych rozprzestrzeniania się przeciwutleniacza BHT w wodzie przepływającej zamkniętym układem przewodów z PE-HD wykazały przyrost zawartości BHT w czasie 72 h do około $3,00e-4$ mg/m³. Zaobserwowane po 12 h badań zmniejszenie zawartości BHT mogło być związane z nierozpoznaną reakcją rozpadu badanego związku w wodzie.

◆ Przeprowadzone za pomocą metody elementów skończonych obliczenia numeryczne rozprzestrzeniania się BHT w wodzie umożliwiły uzyskanie wyników charakteryzujących się znaczną zgodnością z wartościami pomiarów laboratoryjnych. Różnica między pomierzoną i obliczoną zawartością końcową BHT wyniosła 2,1%. Wyznaczona wartość współczynnika korelacji (0,9199) pozwoliła na stwierdzenie, że osiągnięto bardzo dobrą zgodność porównywanych zbiorów. Podstawową różnicą między wynikami pomiarów i obliczeń było wystąpienie wyraźnego pomierzonego przyrostu, a następnie spadku zawartości BHT w wodzie podczas pierwszej doby badań.

◆ Pomiar i obliczenia numeryczne wykazały konieczność prowadzenia dalszych badań przy innych wartościach prędkości przepływu, zmienności faz przepływu–stagnacja w układzie pomiarowym, wykorzystania bardziej rozbudowanych warunków brzegowych do obliczeń numerycznych transportu masy badanego zanieczyszczenia oraz – przede wszystkim – celowość zbadania i opisanie kinetyki reakcji rozpadu BHT w przepływającej wodzie oraz włączenia uzyskanych wyników do opracowanego modelu numerycznego.

Praca została zrealizowana w ramach projektu badawczego nr 4508/B/T02/2009/36.

LITERATURA

1. C. ANSELME, K. N'GUYEN, A. BRUCHET, J. MALLE-VIALLE: Characterization of low molecular weight products desorbed from polyethylene tubing. *Science of Total Environment* 1985, Vol. 47, pp. 371–384.
2. D. BROCCA, E. ARVIN, H. MOSBAK: Identification of organic compounds migrating from polyethylene pipelines into drinking water. *Water Research* 2002, Vol. 36, No. 15, pp. 3675–3680.
3. L. SCHWEITZER, P. TOMBOULIAN, K. ATASI, T. CHEN, D. KHIARI: Utility quick test for analyzing materials for drinking water distribution systems for effect on taste-and-odor. *Water Science and Technology* 2004, Vol. 49, pp. 75–80.
4. A. KOCH: Gas Chromatographic Methods for Detecting the Release of Organic Compounds from Polymeric Materials in Contact with Drinking Water. Hygiene-Institut des Ruhrgebiets, Gelsenkirchen 2004.
5. M. DENBERG, E. ARVIN, O. HASSAGER: Modeling of the release of organic compounds from polyethylene pipes to water. *Journal of Water Supply: Research and Technology – AQUA* 2007, Vol. 56, pp. 435–443.
6. M. J. LETHOLA, I. T. MIETTINEN: Microbiology, chemistry and biofilm development in a pilot drinking water distribution system with copper and plastic pipes. *Water Research* 2004, Vol. 38, pp. 3769–3779.
7. P. TOMBOULIAN, L. SCHWEITZER, K. MULLIN, J. WILSON, D. KHIARI: Materials used in drinking water distribution systems: Contribution to taste-and-odor. *Water Science and Technology* 2004, Vol. 49, pp. 219–226.
8. T.H. HEIM, A.M. DIETRICH: Sensory aspects and water quality impacts of chlorinated and chloraminated drinking water in contact with HDPE and cPVC pipe. *Water Research* 2007, Vol. 41, No. 4, pp. 757–764.
9. B. KOŁWZAN: Zastosowanie czujników biologicznych (biosensorów) do oceny jakości wody. *Ochrona Środowiska* 2009, vol. 31, nr 4, ss. 3–14.
10. J. COMYN: Polymer Permeability. Elsevier, Amsterdam 1985.
11. J.A. BRYDSON: Plastic Materials. 6th ed. Butterworth Heinemann, Oxford 1995.
12. B. KOŁWZAN: Analiza zjawiska biofilmu – warunki jego powstawania i funkcjonowania. *Ochrona Środowiska* 2011, vol. 33, nr 4, ss. 3–14.
13. D. BERRY, C. XI, L. BASKIN: Microbial ecology of drinking water distribution systems. *Current Opinion in Biotechnology* 2006, Vol. 17, pp. 297–302.
14. H. ORTIZ-VAZQUEZ, J. SHIN, H. SOTO-VALDEZ, R. AURAS: Release of butylated hydroxytoluene (BHT) from poly(lactic acid) films. *Polymer Testing* 2011, Vol. 30, pp. 463–471.
15. E. FRIES, W. PUTTMANN: Monitoring of the antioxidant BHT and its metabolite BHT-CHO in German river water and ground water. *The Science of the Total Environment* 2004, Vol. 319, pp. 269–282.
16. BHT: The versatile antioxidant for today and tomorrow. Sherwin-Williams Company, Bull. Ox. 12, Cleveland OH, 1992.
17. G.R. MUNAVALLI, M.S. MOHAN KUMAR: Water quality parameter estimation in a distribution system under dynamic state. *Water Research* 2005, Vol. 39, No. 18, 4287–4298.
18. T.M. WALSKI, D.C. CHASE, D.A. SAVIC: Water Distribution Modeling. Heastad Press, Waterbury, Conn 2001.
19. A. KOTOWSKI, A. PAWLAK, P. WÓJTOWICZ: Modelowanie miejskiego systemu zaopatrzenia w wodę na przykładzie osiedla mieszkaniowego Baranówka w Rzeszowie. *Ochrona Środowiska* 2010, vol. 32, nr 2, ss. 43–48.
20. U. OLSIŃSKA, K. SKIBIŃSKA: Modelowanie zmian jakości wody w systemie dystrybucji. *Ochrona Środowiska* 2007, vol. 29, nr 2, ss. 34–40.
21. I. ZIMOCZ: Modelowanie zmian zawartości trójhalometanów w wodzie wodociągowej. *Ochrona Środowiska* 2011, vol. 33, nr 3, ss. 35–42.
22. A. MUSZ, B. KOWALSKA, M.K. WIDOMSKI: Some issues concerning the problems of water quality modeling in distribution systems. *Ecological Chemistry and Engineering S* 2009, Vol. 16, No. S2, pp. 175–182.
23. J. ŚWIETLIK, U. RACZYK-STANISŁAWIAK, T. LASKOWSKI, J. NAWROCKI: Badania modelowe migracji wybranych pierwiastków z żeliwa i stali do wody na skutek korozji przewodów wodociągowych. *Ochrona Środowiska* 2011, vol. 33, nr 3, ss. 71–76.

24. A.S. AL-OMARI, M. HANIF CHAUDHRY A. FELLOW: Unsteady-state inverse chlorine modeling in pipe networks. *Journal of Hydraulic Engineering* 2001, Vol. 127, No. 8, pp. 669–677.
25. N.B. HALLAM, J. WEST, C.J. FORSTER, I. SPENCER: The decay of chlorine associated with the pipe wall in distribution systems. *Water Research* 2002, Vol. 36, No. 14, pp. 3479–3488.
26. G.I. MUTOTI, J.D. DIETZ, J. AREVALO, J. S. TAYLOR: Combined chlorine dissipation: Pipe material, water quality, and hydraulic effects. *Journal American Water Works Association* 2007, Vol. 99, No. 10, pp. 96–106.
27. R. FARMER, R. PIKE, G. CHENG: CFD analyses of complex flows. *Computers and Chemical Engineering* 2005, Vol. 29, pp. 2386–2403.
28. T. NORTON, D.W. SUN: Computational fluid dynamics (CFD) as an effective and efficient design and analysis tool for the food industry: A review. *Trends in Food Science & Technology* 2006, Vol. 17, pp. 600–620.
29. S.X. LIU, M. PENG: Verification of mass transfer simulation with CFD using highly accurate solutions. *Computers and Electronics in Agriculture* 2005, Vol. 49, pp. 309–314.
30. H. MOHAMMADI, F. BAHRAMIAN: Boundary conditions in simulation of stenosed coronary arteries. *Cardiovascular Engineering* 2009, Vol. 9, No. 3, pp. 83–91.
31. L. MA, P.J. ASHWORTH, J.L. BEST, L. ELLIOTT, D.B. INGHAM, L.J. WHITCOMBE: Computational fluid dynamics and the physical modelling of an upland urban river. *Geomorphology* 2002, Vol. 44, pp. 375–391.
32. P. WESSELING: Principles of Computational Fluid Mechanics. Springer Series in Computational Mathematics, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 2000.
33. Ansys Fluent UDF Manual. Ansys Inc., 2009.
34. B.E. LAUNDER, D.B. SPALDING: The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 1974, Vol. 3, No. 2, pp. 269–289.
35. G. COMINI, S. DEL GIUDICE: A (k-epsilon) model of turbulent flow. *Numerical Heat Transfer* 1985, Vol. 8, No. 2, pp. 133–147.
36. M.K. WIDOMSKI, B. KOWALSKA, D. KOWALSKI, M. KWIETNIEWSKI, J. CZERWIŃSKI: Modelling the concentration of antioxidant BHT migrating from polyethylene pipe to water. Proceedings of Urban Water Systems Conference (URBAN WATER 2012), New Forest Campus, 2012.

Widomski, M.K., Kowalska, B., Kowalski, D. Model Investigations into the Propagation of Butylated Hydroxytoluene (BHT) Migrating from High Density Polyethylene Pipes (HDPE) to Water. *Ochrona Srodowiska* 2012, Vol. 34, No. 3, pp. 33–37.

Abstract: Pipes made of high density polyethylene (HDPE) are widely applied in drinking water distribution systems and household installations. However, the organic compounds used for pipe production (especially antioxidants) may migrate from the pipe walls and thus affect the quality of tap water. This paper presents the results of laboratory tests and numerical computations visualizing the propagation of the antioxidant BHT that migrates from the HDPE pipe into the water. Our laboratory test was conducted using a closed-loop setup, where water circulated in

the pipe interior with a constant flow velocity for 72 hours. BHT concentration in the water was measured by mass spectrometry, while numerical modeling was carried out using the commercial software Fluent (Ansys Inc.), supported by the input data required, and also the initial and boundary conditions. A noticeable increase was observed in the BHT content of the circulating water, which is attributable to the migration of the antioxidant from the HDPE pipe wall into the flowing water. The values obtained from numerical modeling of BHT concentration in the water were in good agreement with those measured in the laboratory setup.

Keywords: Tap water, HDPE pipe, antioxidant, butylated hydroxytoluene (BHT), numerical modeling, computational fluid dynamics (CFD).