

Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise

Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheits- nachweise

Abschlussbericht

Holger Seher (Hrsg.)
Thomas Beuth
Guido Bracke
Ingo Kock
Kim-Marisa Mayer
Helge C. Moog
Stephan Uhlmann
Torben Weyand

September 2016

Anmerkung:

Das FuE-Vorhaben 3615103240 „Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise“ wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) durchgeführt.

Die Arbeiten wurden von der GRS ausgeführt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

GRS - 429
ISBN 978-3-946607-11-3

Deskriptoren:

Dichteberechnung, hochsalinare Lösungen, Integritätsanalyse, Radionuklidspeziation, Szenarientwicklung, Viskosität, Viskositätsberechnung

Kurzfassung

Das Forschungs- und Entwicklungsvorhaben „Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise“ (Förderkennzeichen: 3615I03240, Laufzeit: September 2015 bis September 2016) beschäftigt sich mit Einzelaspekten der Sicherheitsnachweise für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen. Es wurden Arbeiten mit folgenden thematischen Schwerpunkten durchgeführt:

- Die Methoden der Szenarienentwicklung für die Nachverschlussphase im internationalen Raum wurden untersucht, um diese zukünftig zur Störfallentwicklung für die Betriebsphase einzusetzen und die Struktur eines FEP-Katalogs abzuleiten.
- Es wurde eine Methodik zur Ableitung von Rechenfällen aus den Szenarien der Nachverschlussphase dargestellt. Potentielle Ansätze zur Verifizierung der abgeleiteten Szenarien im Vorhaben VSG wurden identifiziert. Außerdem wurden nationale und internationale Richtlinien zur Berücksichtigung von Human Intrusion (HI) in den Sicherheitsnachweisen untersucht.
- Zur Bestimmung der Festphasenzusammensetzung von hoch radioaktiven Abfällen wurde die Speziation von Radionukliden in den Abfallgebinden für wärmeentwickelnde Abfälle mit geochemischen Modellrechnungen untersucht. Berücksichtigt wurden Modellinventare unterschiedlicher Brennelementtypen.
- Um einen geeigneten Ansatz zur Berechnung von Dichte und Viskosität in salinaren Lösungen für den zukünftigen Einsatz in Rechencodes der GRS zu identifizieren, wurden Literaturrecherchen durchgeführt. Unterschiedliche Berechnungsansätze wurden verglichen und deren Gültigkeit und Anwendbarkeit bewertet.
- Die internationale Vorgehensweise zur Integritätsanalyse für die Wirtsgesteine Tonstein und Granit wurde recherchiert und der Bezug zum Begriff der „Integrität“ nach den Sicherheitsanforderungen des BMUB /BMU 10/ hergestellt. Die in /HOT 10/ für das Wirtsgestein Salz identifizierten integritätsgefährdenden Prozesse wurden für die Wirtsgesteine Tonstein und Granit aus internationalen Sicherheitskonzepten ergänzt.

Inhaltsverzeichnis

1	Vorhabensübersicht	1
1.1	Motivation und Zielsetzung	1
1.2	Veröffentlichungen und Publikationen aus dem Vorhaben	5
1.3	Besuchte Konferenzen und Meetings	6
2	Ergebnisse	7
2.1	Szenarienentwicklung bezogen auf die Betriebsphase	7
2.2	Szenarienentwicklung bezogen auf die Nachverschlussphase	8
2.3	Berechnung der Dichte in hochsalinaren Lösungen	9
2.4	Berechnung der Viskosität von salinaren Lösungen.....	10
2.4.1	Ansätze zur Berechnung der Viskosität	10
2.4.2	Zusammenfassung	16
2.5	Speziation der Radionuklide in den Abfallgebinden für wärmeentwickelnde Abfälle	17
2.6	Integritätsgefährdende Prozesse in internationalen Sicherheitskonzepten für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin.....	18
3	Ausblick	21
	Literaturverzeichnis.....	25
	Abbildungsverzeichnis.....	33

1 Vorhabensübersicht

Das Forschungs- und Entwicklungsvorhaben „Weiterentwicklung des internationalen Standes von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise“ (Förderkennzeichen: 3615103240, Laufzeit: September 2015 bis September 2016) beschäftigt sich mit Einzelaspekten der Sicherheitsnachweise für die Endlagerung radioaktiver Abfälle in tiefen geologischen Formationen. Die Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH verfolgt dabei den internationalen Stand von Wissenschaft und Technik zu folgenden Themen und entwickelt ihn dabei weiter:

- Die Szenarienentwicklung für die Betriebs- und Nachverschlussphase,
- die Speziation von Radionukliden in den Abfallgebinden für wärmeentwickelnde Abfälle,
- die Berechnung der Dichte und Viskosität in salinaren Lösungen und
- die Integritätsanalyse für die geologischen und geotechnischen Barrieren.

Zuwendungsgeber des Vorhabens ist das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB).

Der vorliegende Bericht beschreibt die Motivation sowie Aufgabenstellung der jeweiligen Arbeitspakete (Kap. 1.1). In den Arbeitspunkten des Vorhabens wurden jeweils einzelne Fachberichte erstellt (siehe Literaturzitate in Kap. 1.2). Die durchgeführten Arbeiten und daraus erzielte Ergebnisse sind in Kap. 2 zusammengefasst. Abschließend wird ein Ausblick zur Verwendung der Ergebnisse dieses Vorhabens und offene Forschungs- und Entwicklungsarbeiten gegeben (Kap. 3).

1.1 Motivation und Zielsetzung

Arbeitspunkt 1.1 und 1.2: Szenarienentwicklung bezogen auf die Betriebs- und Nachverschlussphase

Die Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle /BMU 10/ fordern Sicherheitsnachweise für verschiedene Betriebszustände eines Endlagers zu führen. Außerdem soll der Nachweis der Langzeitsicherheit über

einen Zeitraum von einer Millionen Jahre erbracht werden. Nach heutigem internationalen Verständnis werden diese Sicherheitsnachweise im Rahmen eines sogenannten „Safety Case“ erstellt und bewertet /IAEA 12/, /NEA 12/. Ein Safety Case umfasst verschiedene Sicherheitsanalysen und -nachweise.

Im heutigen Sprachgebrauch wird der Begriff des Langzeitsicherheitsnachweises teilweise synonym zu dem des Safety Case verwendet, teilweise schließt er aber auch betriebliche Aspekte aus und beschränkt sich auf die Nachverschlussphase. Tatsächlich lassen sich die Betriebsphase und die Nachverschlussphase nicht völlig unabhängig voneinander betrachten. Einerseits liefert der Endlagerbetrieb Anfangs- und Randbedingungen für die Endlagerentwicklung nach Verschluss. Insofern müssen Maßnahmen des Endlagerbetriebs und der Langzeitsicherheit gegeneinander abgewogen werden. Bezüge zwischen der Betriebs- und der Nachverschlussphase werden daher international zunehmend diskutiert, vor allem in Ländern mit fortgeschrittenen Entsorgungsprogrammen.

Für den Nachweis der Langzeitsicherheit können verschiedene Indikatorwerte durch numerische Analysen ermittelt werden, um festzustellen, ob das Schutzziel erreicht wird. Voraussetzung zur Ermittlung der Indikatorwerte ist eine Vorstellung über die zukünftige Entwicklung des Endlagersystems, welches u. a. von den geologischen und klimatischen Gegebenheiten an einem Standort, den eingelagerten Abfällen und der Konzeption des Endlagers abhängt. Die mit der Endlagerung von radioaktivem Abfall befassten Länder haben unterschiedliche Ansätze zur Ableitung von Szenarien entwickelt. Das Ziel der Szenarienentwicklung in der Nachverschlussphase ist aber immer eine systematische, möglichst umfassende und widerspruchsfreie Ableitung von Entwicklungsmöglichkeiten eines Endlagersystems. Ein wichtiges Thema ist auch die Umsetzung von Szenarien in Rechenfällen. Der Endlagerstandort kann aber auch durch zukünftige menschliche Aktivitäten beeinflusst werden. Besonders das menschliche Eindringen („Human Intrusion“, HI) in ein Endlager ist national und international ein wesentlicher Untersuchungsschwerpunkt.

Gerade in den frühen Phasen der internationalen Endlagerprojekte lag der Fokus des Safety Case auf der Erbringung des Langzeitsicherheitsnachweises für die Nachverschlussphase, da dieser für die Standortauswahl von Bedeutung ist. Daher lag auch der Schwerpunkt der Forschung auf diesem Bereich. Mit dem Fortschreiten der Endlagerprojekte rückt nun immer mehr auch die Sicherheit während der Betriebsphase eines Endlagers in den Vordergrund. Dies geschieht insbesondere im GEOSAF Projekt

(International Project on Demonstration of the Operational and Long-Term Safety of Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste) der IAEA /GEO 11/.

Zielsetzung der Arbeiten im Arbeitspunkt 1.1 war es, den internationalen Stand von Wissenschaft und Technik zur Szenarientwicklung in der Nachverschlussphase zu ermitteln, um daraus eine mögliche Struktur für einen FEP-Katalog der Betriebsphase abzuleiten und auf die Betriebsphase anzuwenden (Ergebnisse siehe /UHL 16/ und Kap. 2.1).

Zielsetzung der Arbeiten im Arbeitspunkt 1.2 war die Darstellung der Vorgehensweise bei der Ableitung von Rechenfällen aus der Szenarientwicklung für ausgewählte Länder, die Identifizierung potentieller Ansätze zur Verifizierung der abgeleiteten Szenarien und die Darstellung von nationalen und internationalen Richtlinien zur Berücksichtigung von HI in den Sicherheitsnachweisen (Ergebnisse siehe /BEU 16/ und Kap. 2.2).

Arbeitspunkt 2.1: Mobilisierung, Transport und internationaler Stand

Durch eine verlängerte Zwischenlagerung und auch bei einer späteren Endlagerung von hoch radioaktiven Abfällen können durch den radioaktiven Zerfall und sich zeitlich ändernde Randbedingungen langfristige Veränderungen in den Abfallgebinden auftreten. Experimentelle Untersuchungen zur Speziation von Radionukliden in einem beladenen Behälter mit hoch radioaktiven Abfällen nach einer Zwischenlagerung sind bisher nicht oder nur in sehr geringem Umfang vorhanden.

Kommt es durch die längeren Zeiträume zu Veränderungen der Abfälle (z. B. durch Redoxprozesse, Temperatureinflüsse oder Wechselwirkungen mit Organika) kann dies einen Einfluss auf den Quellterm für die Analyse der Langzeitsicherheit haben.

Zielsetzung der Arbeiten im Arbeitspunkt 2.1 war eine Literaturrecherche, um aus nationalen und internationalen Forschungsarbeiten die mögliche Speziation von Radionukliden nach der Zwischenlagerung (z. B. in CASTOR-Behältern) und während der Endlagerung auszuarbeiten. Wegen fehlender Daten zur Speziation von Radionukliden in der Festphase, wurde auf das bereits in der VSG erarbeitete Radionuklidinventare /LAR 13/ als Grundlage für die geochemischen Rechnungen zur Modellierung der Veränderungen (z. B. infolge des radioaktiven Zerfalls oder des Redoxmilieus) in den Abfallgebinden zurückgegriffen (Ergebnisse siehe /WEY 16a/ und Kap. 2.5).

Arbeitspunkt 2.2: Analyse der Mischung salinärer Lösungen

Bei der Mischung von Laugen unterschiedlicher geochemischer Zusammensetzung im Deckgebirge eines salinaren Endlagers kann es zur Änderung der Dichte und Viskosität kommen. Oft werden Dichte und Viskosität in der Modellierung aus der Gesamtkonzentration der Lösung berechnet und die individuelle Zusammensetzung der Laugen vernachlässigt /HAS 88b/, /LEI 92/, /PRU 99/.

Zielsetzung im Arbeitspunkt 2.2 war eine Literaturrecherche zur Berechnung von Viskosität und Dichte von hochsalinaren Lösungen, um einen geeigneten Ansatz für die Implementierung in die von der GRS verwendeten Strömungs- und Transportcodes zu finden. Für die Berechnung der Viskosität wurde ein Ansatz der GRS /MOO 07/ mit anderen Ansätzen aus der Literatur verglichen. Die im Vorhaben erzielten Ergebnisse zur Dichteberechnung sind in /MAY 16/ dokumentiert und in Kap. 2.3 dargestellt. Die Rechercheergebnisse zur Viskositätsberechnung sind im Kap. 2.4 in diesem Bericht ausgeführt.

Arbeitspunkt 3: Integritätsanalysen für geologische und geotechnische Barrieren

Die Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung für wärmeentwickelnde radioaktive Abfälle /BMU 10/ beschreiben den Begriff der Integrität als den Erhalt der Eigenschaften des Einschlussvermögens des einschlusswirksamen Gebirgsbereichs (ewG) und stellen Kriterien auf, um die Integrität eines Endlagers zu überprüfen. Bisher wurden diese Kriterien auf das Wirtsgestein Salz z. B. im Vorhaben Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben (VSG) angewandt /KOC 12/.

Zielsetzung im Arbeitspunkt 3 war die Ermittlung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zur Integritätsanalyse für die Wirtsgesteine Salzgestein, Tonstein und Granit. Hierzu wurden internationale Konferenzen und Meetings besucht sowie die Sicherheitskonzepte der Länder Frankreich und Schweiz für den Tonstein bzw. Finnland und Schweden für Granit auf integritätsgefährdende Prozesse und Zustände gesichtet. Die Ergebnisse sind in /WEY 16b/ dokumentiert und in Kap. 2.6 kurz dargestellt.

1.2 Veröffentlichungen und Publikationen aus dem Vorhaben

Berichte

Beuth, T., Mayer, K.-M.: Darstellung von nationalen/internationalen Vorgehensweisen bei der Entwicklung von Szenarien für die Nachverschlussphase. Bericht zum Arbeitspaket 1. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-425, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-07-6: Köln, 2016.

Mayer, K.-M., Moog, H.C., Seher, H.: Auswahl eines Ansatzes zur Bestimmung der Dichte in hochsalinaren Lösungen. Bericht zum Arbeitspaket 2. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-426, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-08-3: Köln, 2016.

Uhlmann, S.: Vorgehensweisen bei der Szenarienentwicklung in der Nachverschlussphase von Endlagern in tiefen geologischen Formationen. Bericht zum Arbeitspaket 1. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-424, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-06-9: Köln, 2016.

Weyand, T., Bracke, G., Seher, H.: Speziation von Radionukliden in Abfallgebinden für hoch radioaktive Abfälle. GRS-427, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-09-0, 2016.

Weyand, T., Kock, I.: Integritätsgefährdende Prozesse in internationalen Sicherheitskonzepten für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin. Bericht zum Arbeitspaket 3. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-428, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-10-6, 2016.

Konferenzbeiträge

Mayer, K.-M., Seher, H., Bracke, G., Moog, H. C.: An approach for a simplified calculation of the density of brines. Poster auf der Goldschmidt 2016, Yokohama, Japan.

Uhlmann, S.: A Method for the Assessment of Operational Safety of Final Disposal Facilities Using Probabilistic and Scenario Development. Poster auf dem Waste Management Symposium 2016, Phoenix, USA.

Weyand, T., Bracke, G., Seher, H.: Determination of the solids composition of high-level radioactive waste using PHREEQC. Poster auf der Goldschmidt 2016, Yokohama, Japan.

1.3 Besuchte Konferenzen und Meetings

Im Vorhaben wurden die folgenden Konferenzen und Fachsitzungen besucht.

- Die "Conference on Modeling Natural Barriers - Modeling Storage for Deep Layers" vom 28.09.2015 bis zum 01.10.2015 in Bad Wildbad.
- Das Symposium „EUROCK 2015“ vom 07. bis zum 10.10.2015 in Salzburg, Österreich.
- Das „44. Geomechanik-Kolloquium“ am 13.11.2015 in Leipzig.
- Die Fachtagung „Kriterien für die Standortauswahl“ am 29. und 30.01.2016 in Berlin.
- Die Abschlussveranstaltung des Verbundprojekts „Vergleich aktueller Stoffgesetze und Vorgehensweisen anhand von Modellberechnungen zum thermomechanischen Verhalten und zur Verheilung von Steinsalz“ am 25.02.2016 in Clausthal-Zellerfeld.
- Das „Waste Management Symposium 2016“ vom 06. Bis zum 10.03.2016 in Phoenix, Arizona, USA
- Die Goldschmidt 2016 vom 26.06.2016 bis zum 01.07.2016 in Yokohama, Japan.

2 Ergebnisse

2.1 Szenarientwicklung bezogen auf die Betriebsphase

Zur späteren Entwicklung einer Methodik der Störfallentwicklung für die Betriebsphase, erfolgt in /UHL 16/ eine Darstellung des internationalen und nationalen Standes von Wissenschaft und Technik im Bereich der Szenarientwicklung für die Nachverschlussphase von Endlagern. Es werden Szenarientwicklungsmethoden unterschiedlicher internationaler und nationaler Endlagerprojekte beschrieben. Die betrachteten Endlagerprojekte sind chronologisch aufgelistet und spiegeln den Entwicklungsstand zum jeweiligen Zeitpunkt wieder. Dadurch wird die chronologische Weiterentwicklung der Methodik von einem zum nächsten Vorhaben erkennbar.

Die ersten Projekte (z. B. EVEREST /CAD 96/) nutzen zur Entwicklung von Szenarien einen Bottom-Up-Ansatz. Dazu werden alle bekannten Prozesse und Ereignisse sowie deren Ausprägungen an einem Standort analysiert. Danach wird untersucht, inwieweit diese Prozesse Einfluss auf das Endlagersystem nehmen können. Spätere Projekte wie z. B. ISIBEL /BUH 08/ und in der Szenarientwicklung der schwedischen SKB /SKB 06/ kam ein Top-Down Ansatz hinzu, in dem Sicherheitsfunktionen für einzelne Bereiche bzw. Komponenten im Endlager definiert werden. Sicherheitsfunktionen dienen der Definition sicherheitsrelevanter Anforderungen an Endlagerkomponenten und ermöglichen die Untersuchung, inwiefern Sicherheitsfunktionen durch ablaufende Prozesse oder Ereignisse beeinflusst werden können.

Der Szenarientwicklung liegen FEP-Datenbanken bzw. FEP-Kataloge zu Grunde. Typische Strukturen solcher Datenbanken und Kataloge werden anhand von vier Beispielprojekten sowie der internationalen NEA-FEP-Datenbank in /UHL 16/ dargestellt. Die Auswertung der Datenbank- und Katalogstruktur erfolgte dabei in Hinblick auf die (spätere) Erstellung eines vergleichbaren FEP-Kataloges für die Betriebsphase. In diesem Vorhaben stellt Uhlmann /UHL 16/ Parallelen zwischen beiden Bereichen (Betriebsphase und Nachverschlussphase) dar, um zu identifizieren, welche Einzelpunkte für die Betriebsphase weiterentwickelt werden sollten. Es werden die Attribute angegeben, die als Mindestangaben für jedes FEP für die Betriebsphase aufgeführt werden sollten.

Ferner wurde ein Ansatz für die Herleitung von Sicherheitsfunktionen für die Betriebsphase entwickelt, die sich an der Vorgehensweise in der Szenarientwicklung der Nachbetriebsphase orientiert.

2.2 Szenarientwicklung bezogen auf die Nachverschlussphase

Der Bericht /BEU 16/ dokumentiert die durchgeführten Rechercharbeiten und daraus gewonnene Erkenntnisse in Bezug auf nationale/internationale Vorgehensweisen bei der Entwicklung von Szenarien für die Nachverschlussphase.

Hierzu wurden von ausgewählten Ländern, die zugrundeliegende Vorgehensweise, die bei der Szenarientwicklung zur Anwendung kommen, dargestellt. Zur Einschätzung von möglichen Unterschieden und/oder grundsätzlichen Abweichungen bzw. zum Vergleich, wurde einleitend die in Deutschland im Rahmen des Vorhabens VSG entwickelte Vorgehensweise /BEU 12/ beschrieben. Ein weiterer Aspekt geht auf die Ableitung von Rechenfällen aus entwickelten Szenarien ein.

Neben der Recherche zur nationalen/ internationalen Vorgehensweise in Bezug auf die Szenarientwicklung wurden potenzielle Ansätze, die eine Verifizierung von abgeleiteten Szenarien zur Nachverschlussphase ermöglichen sollen, identifiziert und beurteilt. Den potenziellen Ansätzen liegt der Leitgedanke von Sicherheitsfunktionen zugrunde. Es wurde ein orientierender Überblick zu den aufgestellten Sicherheitsfunktionen zu konkreten Endlagerkonzepten und Endlagerstandorten bzw. Wirtsgesteinen, von denen sich zwei im Kristallingestein (Schweden, Finnland) und ein weiterer in Tongestein (Frankreich) befinden, gegeben. Zusammen mit der Aufstellung von Sicherheitsfunktionen aus dem Vorhaben VerSi /BEU 10/, die sich auf einen Standort in Salz beziehen, liegen für alle zu betrachtenden Wirtsgesteine für einen Endlagerstandort in Deutschland Beispiele vor, die für weitere Anwendungsbetrachtungen und Erprobungen eine potenzielle Ausgangsgrundlage darstellen.

Eine Teilmenge oder auch Sondergruppe von Szenarien stellen diejenigen Entwicklungen dar, die sich auf der Basis eines zukünftigen unbeabsichtigten menschlichen Eindringens in ein Endlager ergeben können. Aufgrund der mit diesen Szenarien verbundenen großen Ungewissheiten in Bezug auf deren Prognose und menschlichen Fähigkeiten und Handlungen in der Zukunft sind zur entsprechenden Behandlung in einem Sicherheitsnachweis klare regulatorische Rahmenbedingungen hilfreich bzw.

erforderlich. Hierzu wurden zu ausgewählten Ländern entsprechende Anforderungen sowie Richtlinien/ Empfehlungen von internationalen Organisationen identifiziert. Analog wurde auch hier zu Vergleichszwecken der in Deutschland zugrunde liegende regulatorische Rahmen einleitend dargestellt. Darüber hinaus wurde auf die mögliche Übertragbarkeit auf andere Standorte, der aus dem VSG Vorhaben vorliegenden Vorgehensweisen unter Berücksichtigung internationaler Entwicklungen, eingegangen.

Abschließend ist festzuhalten, dass die durchgeführte Recherche einen essenziellen Beitrag für die Weiterentwicklung bestehender Ansätze und der Entwicklung diversitärer Ansätze zur Untermauerung/ Verifizierung bereits vorliegender Vorgehensweisen in Deutschland darstellt. Die entsprechenden Entwicklungsarbeiten sollen im Vorhaben „Ableitung von Szenarien für die Langzeitphase von Endlagersystemen in verschiedenen Wirtsgesteinen sowie Integritätsnachweis für die Wirtsgesteine Ton und Kristallin“ (FKZ 3616E03230) umgesetzt werden.

2.3 Berechnung der Dichte in hochsalinaren Lösungen

Ein Rechenmodell zum Bestimmen der Dichte hochsalinärer Lösungen soll zukünftig in ein Strömungs- und Transportprogramm wie beispielsweise TOUGH2 implementiert werden. Aus diesem Grund sind in /MAY 16/ verschiedene Methoden zur Berechnung der Dichte hochsalinärer Lösungen dargestellt. Für drei dieser Rechenmodelle erfolgte eine Überprüfung anhand experimentell bestimmter Zusammensetzungs- und Dichtedaten für verschiedene binäre, ternäre, quinäre und hexäre Systeme. Das Debye-Hückel-Modell (DH-Modell) zeigt für hochsalinare Lösungen die größten Abweichungen zwischen modellierten und experimentell bestimmten Dichten. Im Gegensatz dazu weist das Pitzer-Modell eine sehr hohe und das GRS-Modell eine angemessene Genauigkeit auf, wenn Dichten bevorzugt mit geringeren Abweichungen als $0,01 \text{ g/cm}^3$ bestimmt werden sollen. Die höchsten Ungenauigkeiten der Modelle sind bei Berechnungen hochkonzentrierter MgCl_2 -Lösungen und hochkonzentrierter hexärer Lösungen zu erwarten, worunter auch die für Salzlagerstätten relevante IP21-Lösung fällt. Die vielfach geringere Abweichung des Pitzer-Modells spricht für eine Implementierung dieses in TOUGH2-GRS.

Soll ein Modell implementiert werden, welches binäre Lösungen mit hohen Dichten (z. B. hochkonzentrierte MgCl_2 -Lösungen) möglichst verlässlich berechnen kann, so sind das GRS- und Pitzer-Modell als gleichwertig zu betrachten. Für die Berechnung

komplexerer Systeme ermöglicht das Pitzer-Modell die genaueren Berechnungen. Allerdings ermöglicht das GRS-Modell auch hier zufriedenstellende Ergebnisse. Vorteilhaft ist die geringe Anzahl der Parameter, die dieses Modell gegenüber dem Pitzer-Modell benötigt.

Derzeit kann noch keine Aussage über den Einfluss von Genauigkeiten einer Dichteberechnung auf die Fluidströmung getroffen werden. Daher wurde das Kriterium einer Abweichung von $0,01 \text{ g/cm}^3$ zur Einschätzung frei gewählt. Die Signifikanz dieses Einflusses sollte zukünftig mithilfe von Testrechnungen überprüft werden, um so die Modelle fundierter bewerten zu können.

2.4 Berechnung der Viskosität von salinaren Lösungen

Die Arbeiten zur Viskosität sind in diesem Kapitel ausführlicher behandelt als die anderen Arbeitspunkte des Vorhabens, da es zur Berechnung der Viskosität von salinaren Lösungen keinen eigenständigen Bericht gibt.

Die Viskosität beschreibt die innere Reibung in einer Flüssigkeit und ihre damit verbundene Zähigkeit und stellt eine wichtige Einflussgröße zur Quantifizierung von Strömungs- und Transportprozessen dar. Neben ihrer Abhängigkeit von der Temperatur und der Konzentration der Lösungsbestandteile müssen ionenspezifische Wechselwirkungen berücksichtigt werden, die insbesondere bei hochsalinaren Lösungen von Bedeutung sind. Salzlösungen gleicher Dichte können beispielsweise aufgrund unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung eine abweichende Viskosität aufweisen /ABD 05/, /LEI 92/, /WEI 16/. Modelle zur numerischen Berechnung der Viskosität sind zahlreich, beziehen sich jedoch überwiegend auf niedrigsalinare Lösungen /ABD 05/. Für diese sind auch die meisten Programme zur Transportberechnung ausgelegt, weshalb eine Anpassung für hochsalinare Lösungen erforderlich ist /HAS 88b/, /LAL 07/.

2.4.1 Ansätze zur Berechnung der Viskosität

Im Folgenden werden einige Ansätze zur Berechnung der dynamischen Viskosität η vorgestellt. Aus ihr ergibt sich auch die kinematische Viskosität μ [m^2/s] gemäß

$$\mu = \frac{\eta}{\rho} \tag{2.1}$$

Sie setzt sich aus dem Verhältnis der gemessenen temperaturabhängigen dynamischen Viskosität η [kg/(m · s)] zur Dichte ρ [kg/m³] zusammen.

Die dynamische Viskosität idealer newtonscher Fluide, wie beispielsweise reines Wasser und Gase, wird physikalisch durch das Verhältnis der Scherspannung τ zur Schergeschwindigkeit $\dot{\gamma}$ beschrieben /HER 88/, /MAS 05/:

$$\eta = \frac{\tau}{\dot{\gamma}} \quad (2.2)$$

Im Folgenden sind verschiedene Ansätze zur Berechnung der Viskosität von niedrig bis hoch konzentrierten Salzlösungen angeführt. Die **Falkenhagen-Onsager-Fuoss** und **Debye-Hückel-Onsager Theorie**:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = 1 + D\sqrt{c} \quad (2.3)$$

ist ausschließlich für unendlich verdünnte Lösungen (Gesamtkonzentration $c < 0,05$ mol/l) gültig und beschreibt die Abhängigkeit der Viskosität von der Konzentration. Ein Ansatz (**Jones-Dole Gleichung**) anwendbar auf Lösungen bis 0,1 mol/l

$$\frac{\eta}{\eta_0} = 1 + A\sqrt{c} + Bc \quad (2.4)$$

erfolgte durch Jones und Dole /JON 29/. Dabei wird die relative Viskosität beschrieben als der Quotient aus der dynamischen Viskosität der Salzlösung η und der dynamischen Viskosität des reinen Wassers η_0 . Über die empirischen Koeffizienten A, B, D werden interionare Wechselwirkungen berücksichtigt /ABD 05/, /ABD 08/, /GOL 77/.

Die **erweiterte Jones-Dole Gleichung** ermöglicht eine Ausweitung der Gültigkeit auf Konzentrationen von 0,1 bis 0,2 mol/l mithilfe eines quadratischen Terms:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = 1 + A\sqrt{c} + Bc + Dc^2 \quad (2.5)$$

Durch die Erweiterung mit dem Koeffizienten F wurde die Formel (**ergänzte erweiterte Jones-Dole Gleichung**) auf gesättigte Lösungen (3 mol/l) ausgeweitet (Formel (2.6)) /ABD 08/, /ABD 05/.

$$\frac{\eta}{\eta_0} = 1 + A\sqrt{c} + Bc + Dc^2 + Fc^{2,5} \quad (2.6)$$

Mithilfe der von Einstein /EIN 11/ aufgestellten Formel zur Beschreibung des sogenannten Größeneffekts für eine unendlich verdünnte Suspension von unbeweglichen sphärischen Partikel in einem Kontinuum, konnte durch /THO 65/ folgende Viskositätsbeziehung aufgestellt werden, die für hohe Konzentrationen bis 3 mol/kg gültig ist:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = 1 + 2,5\phi + 10,05\phi^2 + A \exp(B\phi) \quad (2.7)$$

Dabei ist $A = 0,00273$ und $B = 16,6$.

Lencka et al. /LEN 98/ entwickelten ein Modell, das verdünnte bis sehr konzentrierte Lösungen (bis 30 mol/kg H₂O) berechnen kann (es wird daher im Folgenden „**weitreichendes Modell**“ genannt):

$$\frac{\eta}{\eta_0} = 1 + \eta_r^{LR} + \eta_r^S + \eta_r^{S-S} \quad (2.8)$$

wobei η die dynamische Viskosität, η_0 die Viskosität des reinen Wassers und η_r^{LR} , η_r^S und η_r^{S-S} Terme zur Beschreibung der weitreichenden elektrostatischen Effekte (LR) bzw. der einzelnen Spezies (S) und der Spezies-Spezies Wechselwirkungen (S – S) sind. Der Term η_r^{LR} der Onsager-Fuoss Theorie wird dabei durch

$$\eta_r^{LR} = a \frac{1}{\eta_0} \left(\frac{2I}{\varepsilon T_k} \right)^2 \left[\left(\sum_i^{N_1} \frac{\mu_i z_i}{\lambda_i} \right) - 4r \sum_{n=0}^{\infty} c_n s^n \right] \quad (2.9)$$

berechnet, mit der dimensionslosen Konstante a , der dielektrischen Konstante ε , dem absoluten Wert der Ionenladung z und der äquivalenten Ionenleitfähigkeit λ_i . Weiterhin werden die Temperatur in Kelvin T_k benötigt sowie die Vektoren r und s^n , und der Faktor c_n . Weiterhin sind die Ionenstärke I [mol/dm³] und die kinematische Viskosität μ_i von Bedeutung. Die Variablen η_r^S und η_r^{S-S} in Gleichung (2.8) berechnen sich nach

$$\eta_r^S = \sum_i c_i B_i \quad (2.10)$$

$$\eta_r^{S-S} = \sum_i \sum_j f_i f_j D_{ij} I^2 \quad (2.11)$$

Die Beiträge der einzelnen Ionen wird durch den ionenspezifischen Jones-Dole-Koeffizienten B_i gewichtet /LEN 98/. Die Berechnung der spezifischen Wechselwirkungen zwischen Ionen und der neutralen Spezies gelingt über Formel (2.11), wobei f_i und f_j die Anteile der Spezies i bzw. j und D_{ij} den Wechselwirkungsparameter zwi-

schen den beiden Spezies darstellen /ABD 05/, /LEN 98/. Für 2:1 Elektrolyten wie MgCl_2 , CaCl_2 oder H_2CrO_4 kann die Viskosität für molale Konzentrationen bis zu 16 m bestimmt werden. Die Viskosität von 3:1 Elektrolyten kann für molale Konzentrationen bis zu ca. 8 m bestimmt werden und für das $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 + \text{Na}_2\text{SO}_4 + \text{KCl}$ System kann die Viskosität bis zu einer molalen Konzentration von 3 m verlässlich berechnet werden /LEN 98/.

Abb. 2.1 zeigt die Übereinstimmung der berechneten mit der experimentellen Viskosität für 1:1 Elektrolyte. Weitere Überprüfungen erfolgten auch für 2:1 bzw. 3:1 Elektrolyte /LEN 98/.

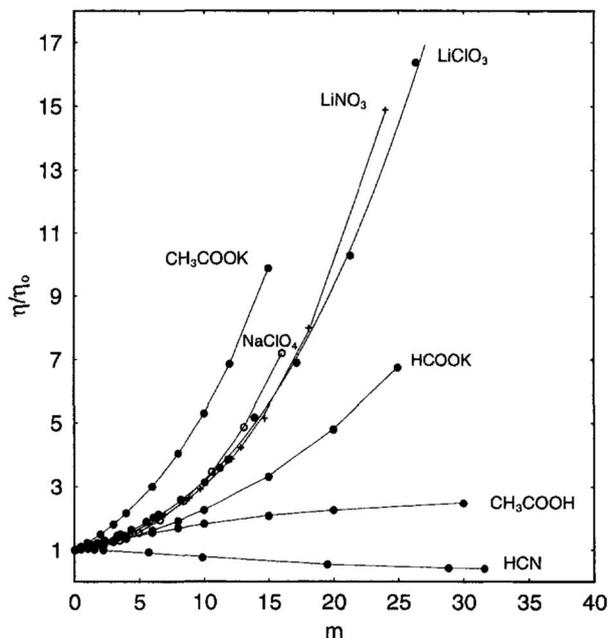


Abb. 2.1 Vergleich der berechneten relativen dynamischen Viskosität (Linien) mit experimentellen Messungen (Punkte) /LEN 98/

1:1 Elektrolyte bei einer Temperatur von 25 °C; m ist die Molalität [mol/kg H₂O]

Ein weiterer **empirischer Ansatz von van der Vorst** /VAN 84/ bezieht sich auf den Massenanteil ω und einige Konstanten, um die Viskosität innerhalb einer Genauigkeit von 1 % wiedergeben zu können.

$$\eta = 1,002 \cdot 10^{-3} (1 + 0,4819\omega - 0,2774\omega^2 + 0,7814\omega^3) \quad (2.12)$$

Hierbei fehlen allerdings Angaben zum betrachteten Konzentrationsspektrum bzw. zur Komplexität der Elektrolytlösungen /HER 88/. Dieser Ansatz wird auch von /PRU 99/ bei der Berechnung der Viskosität einer Mischung η_m angewendet.

$$\eta_m = \eta_0 \cdot (1 + 0,4819\omega - 0,2774\omega^2 + 0,7814\omega^3) \quad (2.13)$$

Für das **Modell von Laliberté /LAL 07/** wurden auf Basis experimenteller Daten elementspezifische Konstanten zur Berechnung der Viskosität generiert, um so unter der Berücksichtigung ionischer Wechselwirkungen auch die Viskosität von Mischungen rechnerisch bestimmen zu können. Das Lösungsspektrum umfasst binäre bis quinäre Systeme sowie Zuckerverbindungen. Es wird zwischen der Mischungsregel und dem Viskositätsmodell unterschieden. Angelehnt an den Ansatz von Arrhenius, entwickelte /LAL 07/ eine entsprechende Formel zur Beschreibung der Mischungen:

$$\eta_m = \eta_w^{\omega_w} \prod \eta_i^{\omega_w} \quad (2.14)$$

Zur Berechnung der dynamischen Viskosität der Mischung η_m wird das Produkt aus der dynamischen Viskosität reinen Wassers η_w und der einzelnen Wasserinhaltsstoffe η_i gebildet, wobei diese jeweils den Massenanteil des Wassers ω_w im Exponenten beinhalten. Vorausgesetzt wird dabei eine Temperaturabhängigkeit der Viskosität von Wasser und eine Temperatur- und Konzentrationsabhängigkeit der Viskosität von den Lösungsinhaltsstoffen.

Die Viskosität des Wassers wird nach Formel (2.15) berechnet und ist für einen Temperaturbereich von 0 bis 100 °C entwickelt worden. Abweichungen zu gemessenen Werten liegen unter 0,1 % /LAL 07/.

$$\eta_w = \frac{T_c + 246}{(0,05594T_c + 6,2842)T_c + 127,37} \quad (2.15)$$

T_c ist die Temperatur in Grad Celsius.

Die Formel

$$\eta_i = \exp\left(\frac{x_1(1 - \omega_w)^{x_2} + x_3}{(x_4 + 1)(x_5(1 - \omega_w)^{x_6} + 1)}\right) \quad (2.16)$$

wird in Gleichung (2.14) zur Bestimmung der Viskosität der Elektrolytlösung verwendet. Dabei sind die Konstanten x_1 bis x_6 Anpassungsparameter /LAL 07/.

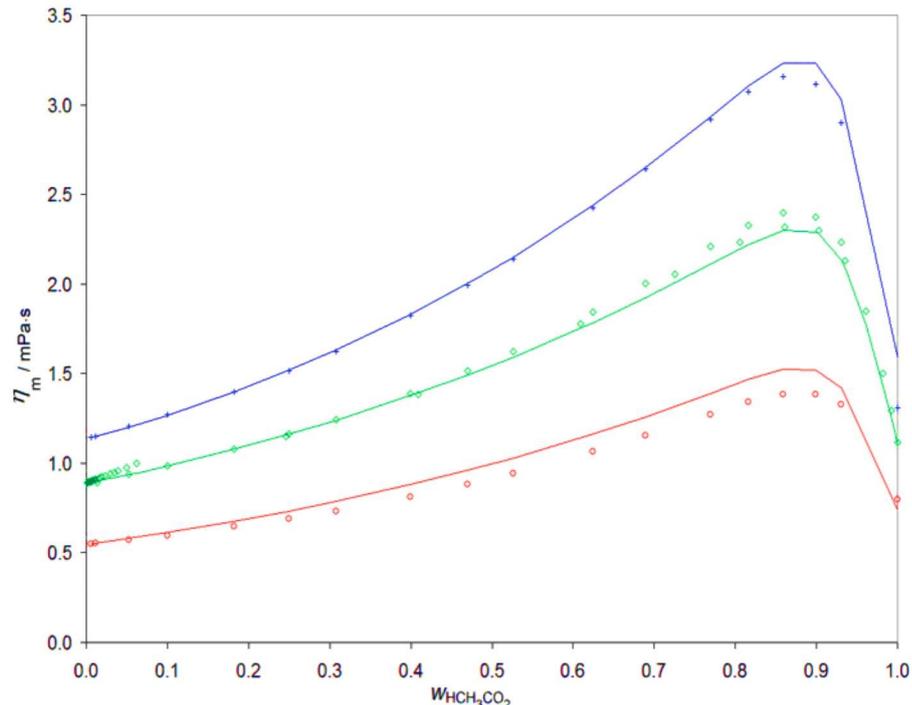


Abb. 2.2 Dynamische Viskosität der Essigsäure bei 15 (blau), 25 (grün) und 50 °C (rot). Linien stellen experimentelle und Symbole berechnete Daten dar /LAL 07/

$$s_{\delta_{\eta}} = \sqrt{\frac{\sum \delta_{\eta}^2}{n-1}} \quad (2.17)$$

Die mittlere Abweichung δ_{η} zu gemessenen Werten für die von /LAL 07/ betrachteten Systeme beträgt 0,05 % und die Standardabweichung $s_{\delta_{\eta}}$ 3,7 %, berechnet nach Formel (2.17). In Abb. 2.2 sind exemplarisch die Ergebnisse der Berechnungen und Messungen für die Viskosität von Essigsäure für verschiedene Temperaturbereiche dargestellt. Mithilfe der angepassten Konstanten kann eine hohe Übereinstimmung erzeugt werden. Befindet sich mehr als ein Lösungsinhaltsstoff in der Lösung, beträgt die mittlere Abweichung zu den gemessenen Werten -2,7 %. Die Standardabweichung von 16,1 % ist aufgrund einiger Ausreißer im LiCl und LiNO₃ System erhöht. Für das quinäre Na-K-Mg-Cl-SO₄ System wurde eine Abweichung von 0,23 % und eine Standardabweichung von 0,31 % festgestellt. Dabei wurde ein Temperaturbereich zwischen 25 und 150 °C betrachtet und 35 Datenpunkte, die Ionenstärken von 0,7 bis 3,5 mol/kg besitzen, berechnet /FAB 69/, /LAL 07/. Wird eine Interpolation auf weitere Daten mithilfe der berechneten Konstanten angestrebt, gelingt dies mit einer vergleichbaren Genauigkeit. Bei der Extrapolation hingegen wurden deutlich höhere Abweichungen ermit-

telt, weshalb sich der Ansatz nur für den von /LAL 07/ berücksichtigten Konzentrationsbereich und die von ihm betrachteten Systeme eignet.

Zusätzlich besteht die Möglichkeit, die Viskosität mit einem sogenannten „**realistischen Ansatz**“ /OSW 98/ über ein Polynom dritten Grades zu bestimmen (Formel (2.18)). Bei höheren Variationen bzw. Konzentrationsgehalten bietet dieser, innerhalb einer Übereinstimmung von 0,5 % mit experimentellen Daten, eine geeignete Methode zur Berechnung der Viskosität /HAS 88a/, /HAS 88b/, /LEI 92/, /OSW 98/.

$$\mu = \mu_0 (1 + 1,85\omega - 4,1\omega^2 + 44,5\omega^3) \quad (2.18)$$

2.4.2 Zusammenfassung

Für die Bewertung der Langzeitsicherheit von Endlagen in Salzgestein ist es erforderlich, einen Ansatz zur Berechnung der Viskosität im Modellierprogramm zu wählen, welcher für hochkonzentrierte Salzlösungen, wie gesättigte NaCl-Lösungen oder komplexe gesättigte Systeme (z. B. quinäre Systeme), geeignet ist. Aus diesem Grund werden im Folgenden die Ansätze zusammengefasst, die hierfür geeignet sein können.

Das **Modell von /LAL 07/** eignet sich für Viskositätsberechnungen, welche die von ihm berücksichtigten Systeme betrifft sowie sich innerhalb des untersuchten Konzentrationspektrums befindet. Für die Endlagerung relevante und in der Arbeit behandelte Salzlösungen sind u. a. das K-Na-Cl, das Na-Mg-SO₄-Cl sowie das Na-K-Mg-Cl-SO₄ System. Auf diese spezifischen Systeme wäre das Modell anwendbar, dabei ist das Na-K-Mg-Cl-SO₄ System jedoch nur für die Interpolation von Lösungen mit Ionenstärken von 0,7 bis 3,5 mol/kg geeignet. Für eine Extrapolation ist das Modell aufgrund hoher Abweichungen nicht geeignet.

Das **Modell von /LEN 98/** zeigt eine hohe Übereinstimmung auch für binäre Systeme wie MgCl₂, komplexere Lösungen mit 3:1 Elektrolyten wie H₃PO₄ oder das (NH₄)₂SO₄ + Na₂SO₄ + KCl System. Die Übertragbarkeit auf endlagerrelevante Lösungen müsste jedoch mit gemessenen Werten überprüft werden, genauso die mögliche Anwendung auf quinäre oder hexäre Lösungen.

Mit dem **empirischen Ansatz von /VAN 84/** konnten Abweichung von 1 % erzielt werden. Da /VAN 84/ jedoch keine Angaben zum Konzentrationspektrum und zu den untersuchten Systemen machen, muss die Anwendbarkeit für hochsalinare Lö-

sungen geprüft werden. Der Ansatz wird von /PRU 99/ bereits für die Berechnung der Viskosität von Elektrolytlösungen angewendet.

2.5 Speziation der Radionuklide in den Abfallgebinden für wärmeentwickelnde Abfälle

Der Bericht /WEY 16a/ wurde gemeinsam mit dem Vorhaben „Forschung und Entwicklung zu Methoden und Instrumenten des Langzeitsicherheitsnachweises, EMIL“ (Förderkennzeichen 3614R03200) erstellt. Ziel war, die Speziation der Radionuklide (Aktinide und Spaltprodukte) in den Abfallgebinden für hochradioaktive Abfälle und für beschädigte und unbeschädigte Brennstäbe sowie weitere Brennstoffmatrizes zu beschreiben und zu berechnen.

Dazu wurde in einer Literaturrecherche das Abfallinventar von hochradioaktiven Abfällen dargestellt. Dies sind bestrahlte Brennelemente aus Leistungs-, Prototyp- und Forschungsreaktoren sowie Abfälle aus der Wiederaufbereitung von bestrahlten Brennelementen. Die Literaturrecherche umfasste auch die Lagerung der Abfallstoffe mit Darstellung der unterschiedlichen Behältertypen und der Lagerung von beladenen Behältern in Zwischenlagern in Deutschland.

Aufbauend auf der Literaturrecherche wurde mit geochemischen Modellrechnungen mit PHREEQC /PAR 13/ die Festphasenzusammensetzung von hochradioaktiven Abfallstoffen in den Behältern in mehreren Variationsrechnungen mit unterschiedlichen Annahmen z. B. bzgl. Redoxmilieu ermittelt. Hierzu gehört auch die zeitliche Veränderung der Festphasenzusammensetzung infolge des radioaktiven Zerfalls. Es wurden Modellinventare für hochradioaktive Abfallstoffe in unterschiedlichen Behältern abgeleitet und die Radionuklid- und Elementmassen für typische, mit Abfallstoffen beladene Behälter ermittelt.

In den geochemischen Berechnungen wurden qualitätsgesicherte thermodynamische Daten zur Bildung der Festphasen von /THO 14/ berücksichtigt. Im Basisfall wurden reduzierende Bedingungen angenommen, die in einem intakten Behälter für hochradioaktive Abfälle vorliegen sollten. Die Berechnungen wurden für unterschiedliche Modellinventare durchgeführt (DWR-MOX, DWR-UO₂, SWR-MOX, SWR-UO₂). In Variationsrechnungen wurden wasserstofffreie Festphasen berücksichtigt, da der Feuchtegehalt in einem Behälter für hochradioaktive Abfälle zu gering ist, um Hydroxi-

de und wasserhaltige Festphasen zu bilden. Auch der Einfluss des Defekts eines Behälters auf die Festphasenzusammensetzung wurde in einer Variationsrechnung gewürdigt, indem der Luftkontakt und eine damit einhergehende Oxidation (unter Vernachlässigung der Reaktionskinetik) der Metalle angenommen wurden.

2.6 Integritätsgefährdende Prozesse in internationalen Sicherheitskonzepten für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin

Im Bericht /WEY 16b/ wird gezeigt, dass im internationalen Kontext der Begriff der Integrität nicht einheitlich und nicht übereinstimmend mit dem Integritätsbegriff nach /BMU 10/ verwendet wird. Dennoch lässt sich aus der Betrachtung integritätsgefährdender Prozesse in internationalen Sicherheitsanforderungen und –konzepten ein Integritätsverständnis für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin ableiten, das in zukünftigen Forschungs- und Entwicklungsvorhaben weiterentwickelt werden kann, um schließlich einen quantitativen Integritätsnachweis führen zu können.

Für das Wirtsgestein Salz wurden bereits national Integritätskriterien (Fluiddruck- und Dilatanzkriterium) ermittelt und ein Integritätsnachweis durchgeführt. Für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin sind die Integritätskriterien nach /BMU 10/ bislang nicht gesondert betrachtet worden. Hierfür erscheint besonders das Temperaturkriterium für Tonstein und tonreiche geotechnische Barrieren im Kristallingestein (Bentonit) relevant, da thermisch induzierte Prozesse wie Mineralumwandlungen die mechanischen Eigenschaften von Tonstein bzw. Bentonit verändern können. Auch das Advektionskriterium ist für Tonstein und Kristallin von Bedeutung, da (insbesondere im Kristallin) häufig Kluftnetzwerke existieren und ein advektiver Fluss in internationalen Sicherheitskonzepten erst durch zusätzliche Kriterien und Maßnahmen eingeschränkt wird.

Darüber hinaus bewirken im Kristallin nicht das Wirtsgestein, sondern der Behälter und die im Zusammenhang stehenden geotechnischen Barrieren den Einschluss der Radionuklide. Daher werden im KBS-3 Konzept von Schweden und Finnland der Begriff der Behälterintegrität verwendet, deren Erhalt durch primäre Sicherheitsfunktionen bzgl. Korrosionsbeständigkeit und dem Widerstand gegenüber isostatischem Druck sowie Scherbewegungen gewährleistet wird. Diese primären Sicherheitsfunktionen werden durch Anforderungen an den Bentonit als Buffer und Versatzmaterial sowie die Geosphäre unterstützt.

Die national identifizierten integritätsgefährdenden Prozesse und Zustände für das Wirtsgestein Salz werden grundsätzlich auch in den internationalen Sicherheitsanforderungen und –konzepten der Länder Frankreich, Schweiz, Finnland und Schweden betrachtet. Allerdings werden wirtsgesteins- und sicherheitskonzeptspezifisch bestimmte integritätsgefährdenden Prozesse und Zustände in einem unterschiedlichen Detaillierungsgrad betrachtet. Dies resultiert insbesondere aus den unterschiedlichen Endlagerkonzepten. Zum Beispiel basiert das Integritätsverständnis in Deutschland auf dem Konzept des einschlusswirksamen Gebirgsbereiches (ewG-Konzept). In internationalen Konzepten wie von Finnland und Schweden beruht der langzeitsichere Einschluss hingegen auf technischen Barrieren. Die integritätsgefährdenden Prozesse wurden in einem unterschiedlichen Tiefgang betrachtet und sollen in zukünftigen Forschungs- und Entwicklungsvorhaben näher untersucht werden.

3 Ausblick

AP 1.1: Szenarientwicklung in der Betriebsphase

Mit dem AP 1.1 wurde der Stand von Wissenschaft und Technik in Bezug auf das methodische Vorgehen in der Szenarientwicklung beschrieben. Dies stellt den Sachstand und damit die Grundlage für das weitere Vorgehen im BMUB-Vorhaben 3615E03230 (Bewertung der Methoden zur Durchführung und Analyse der Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise von Endlagern) dar. Die methodische Vorgehensweise soll im Vorhaben 3615E03230 auf die Betriebsphase übertragen werden und zur Zusammenstellung von Störfällen dienen. Ein erster Ansatz für die Übertragung von Vorgehensweisen auf die Betriebsphase wurde bereits im AP 1.1 entworfen.

AP 1.2: Szenarientwicklung in der Nachverschlussphase

Die im Bericht /BEU 16/ dokumentierten Rechercheergebnisse zur Ableitung von Rechenfällen aus der Szenarientwicklung, der Richtlinien zur Human Intrusion und eine Methodik zur Verifizierung des Ansatzes aus der VSG liefern einen Beitrag für die Weiterentwicklung bestehender Ansätze und der Entwicklung diversitärer Ansätze zur Untermuerung und Verifizierung bereits vorliegender Methoden in Deutschland.

AP 2.1: Berechnung der Dichte und Viskosität in hochsalinaren Lösungen

Das GRS-Modell zur Berechnung der Dichte hochsalinärer Lösungen wurde für eine zukünftige Verwendung in den von der GRS verwendeten Strömungs- und Transportcodes (wie etwa MARNIE, TOUGH2-GRS oder TOUGHREACT) ausgewählt, da es im Vergleich zum Pitzer-Modell weniger Eingabeparameter besitzt, trotzdem aber eine genügende Genauigkeit liefert. In einem weiteren Vorhaben könnte das GRS-Modell zur Dichteberechnung weiter verbessert werden, wenn die zur Parameteroptimierung verwendeten Lösungsdaten hinsichtlich ihrer Bedeutung für die endlagerrelevanten Lösungen selektiert oder zumindest gewichtet würden. Überdies steht mit dem Joint Expert Speciation System (JESS) der Murdoch University in Australien /JESS 15/ ein interessantes Tool zur Verfügung, mit dessen Hilfe mit wenig Aufwand insbesondere die jüngere Literatur nach Dichtedaten durchsucht werden kann.

Durch Implementierung des GRS-Modells zur Dichteberechnung in die von der GRS verwendeten Transportcodes könnte geprüft werden, wie genau die Dichte einer Lö-

sung überhaupt bekannt sein muss, um eine sinnvolle Verbesserung des Transportcodes zu erhalten.

Die Viskosität von niedrigrisalinaren Lösungen kann über viele verschiedene Ansätze bestimmt werden. Handelt es sich jedoch um hochsalinare komplexe Lösungssysteme, wie beispielsweise quinäre oder hexäre Systeme salinärer Lösungen, ist die Berechnung aufgrund von Ionen-Wechselwirkungen erschwert. Die Grenzen der untersuchten Modelle sind in der jeweiligen Literatur teilweise sehr vage angegeben. Um die Viskosität von komplexen Salzlösungen verlässlich bestimmen zu können, müsste zukünftig ein Vergleich zwischen experimentellen und berechneten Werten hochsalinärer Lösungen erfolgen – ähnlich wie es in /MAY 16/ für die Dichte durchgeführt wurde. Auf dieser Basis kann eine eindeutige Bewertung der Rechenansätze anschließen. Hierfür eignen sich vor allem die Modelle von /VAN 84/ und /LEN 98/.

AP 2.2: Speziation der Radionuklide in den Abfallgebänden für wärmeentwickelnde Abfälle

Die Rechnungen zur Speziation der Radionuklide wurden mit PHREEQC unter der programmtechnisch bedingten Annahme der Anwesenheit von Wasser durchgeführt. Da in einem Endlagerbehälter nur geringe Mengen an Wasser zur Verfügung stehen, sollten die Berechnungen mit weiteren geochemischen Codes überprüft werden. Hier ist besonders der Code CHEMAPP /PET 07/ zu nennen, der Festphasenzusammensetzungen und auch Festphasenreaktionen wasserfrei berechnen kann. Für einen Vergleich der Ergebnisse zwischen den Codes muss allerdings eine für beide Codes geeignete thermodynamische Datenbasis verwendet werden. Hierfür sind ggf. Entwicklungsarbeiten notwendig, da zum Beispiel die hier gewählte thermodynamische Datenbasis der PSI/NAGRA /THO 14/ nur mit PHREEQC kompatibel ist. Denkbar ist die Entwicklung eines Konvertierungstools, wie es für das Vorhaben EMIL erfolgt ist /SEH 16/.

Die geochemischen Berechnungen sollten des Weiteren mit unterschiedlichen thermodynamischen Datenbasen erfolgen. Aus dem Vergleich können Rückschlüsse erzielt werden, inwiefern die Berechnung der Festphasenzusammensetzung von den thermodynamischen Daten abhängig ist (Sensitivitätsanalyse).

Weitere Entwicklungsarbeiten sind langfristig auch an den thermodynamischen Datenbasen notwendig. Es wäre wünschenswert eine konsistente und qualitätsgesicherte

Datenbasis vorzuweisen, die sämtliche Elemente bzw. Radionuklide des Abfallinventars in unterschiedlichen Oxidationsstufen abdeckt und mit der eine Berechnung von wasserstofffreien Festphasen möglich ist. Ein Beispiel hierfür ist das Vorhaben THEREDA /ALT 11/, das eine konsistente und qualitätsgesicherte Datenbasis für unterschiedliche Programmcodes zur Verfügung stellt. Allerdings sind bisher die wasserstofffreien Festphasen nicht berücksichtigt.

Die verwendeten thermodynamischen Daten gelten für eine konstante Temperatur. Da Bildungsreaktionen von Festphasen stark temperaturabhängig sind, sollten die thermodynamischen Daten mit temperaturabhängigen Koeffizienten erweitert werden. Dies gilt auch vor dem Hintergrund, dass es sich bei den hoch radioaktiven Abfällen um wärmeentwickelnde Abfälle handelt, wenn auch mit abnehmenden Temperaturen über längere Zeiträume.

Die vorliegende Studie konnte nicht abschließend zeigen, wie die simulierten Änderungen der Festphase und der Redoxbedingungen abhängig von dem sich zeitlich ändernden Abfallinventar infolge des radioaktiven Zerfalls sind. Hierfür sind weitere detaillierte Analysen und Auswertungen nötig. Dies betrifft insbesondere die Redoxprozesse, die aufgrund der programmtechnisch bedingten Annahmen nur sehr eingeschränkt in Variationsrechnungen abgebildet werden konnten, aber für die Aktualisierung von Quelltermen von Bedeutung sind, da diese die Löslichkeit und Mobilität der Radionuklide im Fall eines Lösungszutrittes bzw. Defekts eines Behälters mit hoch radioaktiven Abfällen erheblich beeinflussen. Daher besteht hier weiterhin Aktualisierungs- und Entwicklungsbedarf zur Berechnung der Speziation der Radionuklide in den Abfallgebinden über längere Zeiträume.

AP 3: Integritätsgefährdende Prozesse in internationalen Sicherheitskonzepten für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin

Das Wirtsgestein Steinsalz stand in Deutschland lange Zeit im Fokus der Endlagerforschung. In Deutschland wurde bisher kein potentieller Standort mit den Wirtsgesteinen Ton/Tonstein oder Kristallin detailliert untersucht. Erstmals durchgeführt wurde eine vollständige Integritätsanalyse nach den bis heute geltenden Sicherheitsanforderungen /BMU 10/ im Rahmen des Vorhabens „Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben“ mit Steinsalz als Wirtsgestein. Sowohl für die Integrität der geologischen als auch der geotechnischen Barrieren /MÜL 12/ wurde eine dem Nachweis entsprechende Analyse durchgeführt. Für das Wirtsgestein Steinsalz kann dies heute als Stand von

Wissenschaft und Technik angesehen werden. Für Tonstein und Kristallin sind ähnliche Untersuchungen noch nicht durchgeführt worden. /WEY 16b/ erweitert die Betrachtungen von /HOT 10/ und liefert damit eine weitere Grundlage, die Kriterien für eine Integritätsanalyse aus /BMU 10/ auf diese beiden Wirtsgesteinsarten zu übertragen.

Für das Wirtsgestein Ton/Tonstein sollte zunächst ein detailliertes Verständnis über dessen Langzeitverhalten in Bezug auf Vorkommen in Deutschland erarbeitet werden. Hierzu gehören eine weitergehende Analyse der integritätsgefährdenden Prozesse und die Entwicklung eines Konzepts zur Umsetzung der „Langzeitaussage zur Integrität des ewG“ nach den Sicherheitsanforderungen /BMU 10/. Neben der Entwicklung eines Verfahrens- und Ablaufkonzeptes sollten die Integritätskriterien hinsichtlich der zu erfolgenden Prüfung anhand des Material- und Transportverhaltens von Ton/Tonstein konkretisiert werden.

Für das Wirtsgestein Kristallin sollte untersucht werden, inwieweit die in den Sicherheitsanforderungen /BMU 10/ formulierten Integritätskriterien in Hinblick auf das Wirtsgestein Kristallin zu interpretieren und anzuwenden sind. Eine Überprüfung, ob ein Endlager im Wirtsgestein Kristallin durch die Sicherheitsanforderungen vollständig abgedeckt ist, wird auch von /KOM 16/ empfohlen. Es sollte aufbauend auf den Ergebnissen dieses Vorhaben ein umfassendes Verständnis der integritätsgefährdenden Prozesse in Kristallinkonzepten in Bezug auf die deutschen Sicherheitsanforderungen entwickelt werden, die mechanisch, thermisch, mikrobiell, hydrogeologisch und insbesondere geo- bzw. hydrochemisch induziert sind. Hierzu gehört auch die Prüfung und Bewertung der Übertragbarkeit des finnischen und schwedischen Integritätsnachweises im Kristallin auf ein Endlager in Kristallinformationen in Deutschland. Es sollen Vorschläge für einen Integritätsnachweis in einem deutschen Endlager im Kristallin in Hinblick auf die Sicherheitsanforderungen entwickelt werden.

Literaturverzeichnis

- /ABD 05/ Abdulagatov, I.M., Azizov, N.D.: Viscosities of aqueous LiI solutions at 293–525K and 0.1–40MPa, *Thermochimica Acta*, Bd. 439, 1-2, S. 8–20, DOI 10.1016/j.tca.2005.08.036, 2005.
- /ABD 08/ Abdulagatov, I.M., Assael, M.J.: Viscosity. In: *Hydrothermal experimental data. Phase equilibria and solution properties in binary and ternary systems above 200 C.* Hrsg: Valyashko, V.M., S. 249–270, ISBN 9780470094655, ebrary, Inc, Wiley: Chichester, West Sussex, 2008.
- /ALT 11/ Altmaier, M., Brendler, V., Bube, C., Neck, V., Marquardt, C., Moog, H.C., Richter, A., Schrage, T., Voigt, W., Wilhelm, S., Willms, T., Wollmann, G.: THEREDA - Thermodynamische Referenz-Datenbasis. Abschlussbericht, GRS-265, 863 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH; AF-Colenco AG; Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf - Institut für Radiochemie (HZDR-IRC); Karlsruher Institut für Technologie - Institut für Nukleare Entsorgung (KIT-INE); TU Bergakademie Freiberg - Institut für Anorganische Chemie (TU-BAF): Braunschweig, 1. März 2011.
- /BEU 10/ Beuth, T., Bracke, G.: VerSi Darstellung der Arbeiten zur Ableitung von Szenarien, Abschlussbericht zum Vorhaben 3607R02580 „Szenarientwicklung“, GRS-A-3525, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 1. März 2010.
- /BEU 12/ Beuth, T., Bracke, G., Buhmann, D., Dresbach, C., Hammer, J., Keller, S., Krone, J., Lommerzheim, A., Mönig, J., Mrugalla, S., Rübel, A., Wolf, J.: Szenarientwicklung für die Endlagervariante AB1. Kammerlagerung der vernachlässigbar wärmeentwickelnden Abfälle im Südwestflügel und Streckenlagerung der wärmeentwickelnden Abfälle im Nordostflügel des Salzstockes Gorleben. Zwischenbericht zum Arbeitspaket 8, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2012.

- /BEU 16/ Beuth, T., Mayer, K.-M.: Darstellung von nationalen/internationalen Vorgehensweisen bei der Entwicklung von Szenarien für die Nachverschlussphase. Bericht zum Arbeitspaket 1. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-425, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-07-6: Köln, 2016.
- /BMU 10/ Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU): Sicherheitsanforderungen an die Endlagerung wärmeentwickelnder radioaktiver Abfälle, 21 S.: Bonn, 30. September 2010.
- /BUH 08/ Buhmann, D., Mönig, J., Wolf, J., Heusermann, S., Keller, S., Weber, J.R., Bollingerfehr, W., Filbert, W., Kreienmeyer, M., Krone, J., Tholen, M.: Zusammenfassender Abschlussbericht. Überprüfung und Bewertung des Instrumentariums für eine sicherheitliche Bewertung von Endlagern für HAW (Projekt ISIBEL), TEC-09-2008-AB, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH; DBE TECHNOLOGY GmbH (DBETEC); Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR): Braunschweig, April 2008.
- /CAD 96/ Cadelli, N., Des Escalier Orres, P., Marivoet, J., Martens, K.-H., Prij, J.: Evaluation of elements responsible for the effective engaged dose rates associated with the final storage of radioactive waste. Everest project. Summary Report, Nuclear Science and Technology, EUR 17122 EN, European Commission (EC), 296 S., ISBN 92-827-8621-8, Office for Official Publications of the European Communities: Luxembourg, 1996.
- /EIN 11/ Einstein, A.: Berichtigung zu meiner Arbeit: „Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen“, Annalen der Physik, Bd. 34, S. 591–592, 1911.
- /FAB 69/ Fabuss, B.M., Korosi, A., Othmer, D.F.: Viscosities of aqueous solutions of several electrolytes present in sea water, Journal of Chemical & Engineering Data, Bd. 14, Nr. 2, S. 192–197, DOI 10.1021/je60041a025, 1969.

- /GEO 11/ GEOSAF Working Group on Operational Safety: GEOSAF Position paper on operational safety. Main outcomes, 3 S., International Atomic Energy Agency (IAEA): Vienna, 2011, erreichbar unter <https://www-ns.iaea.org/downloads/rw/projects/geosaf/position-paper.pdf>, zitiert am 31. März 2016.
- /GOL 77/ Goldsack, D.E., Franchetto, R.: The viscosity of concentrated electrolyte solutions. I. Concentration dependence at fixed temperature, Canadian Journal of Chemistry, Bd. 55, Nr. 6, S. 1062–1072, DOI 10.1139/v77-148, 1977.
- /HAS 88a/ Hassanizadeh, S.M.: Modeling Species Transport by Concentrated Brine in Aggregated Porous Media, Transport in Porous Media, Nr. 3, S. 299–318, 1988.
- /HAS 88b/ Hassanizadeh, S.M., Leijense, T.: On the Modeling of Brine Transport in Porous Media, Water Resources Research, Bd. 24, Nr. 3, S. 312–330, 1988.
- /HER 88/ Herbert, A.W., Jackson, C.P., Lever, D.A.: Coupled Groundwater Flow and Solute Transport with Fluid Density Strongly Dependent on Concentration, Water Resources Research, Bd. 24, Nr. 10, S. 1781–1795, DOI 10.1029/WR024i010p01781, 1988.
- /HOT 10/ Hotzel, S.: Behandlung der Integrität im Langzeitsicherheitsnachweis für ein Endlager im Salinar. 3605R02548: Verfolgung und Bewertung der Fortentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik beim Nachweis der Langzeitsicherheit von Endlagern, Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3447, 50 S.: Köln, Mai 2010.
- /IAEA 12/ International Atomic Energy Agency: The Safety Case and Safety Assessment for the Disposal of Radioactive Waste, IAEA Safety Standards Series, Specific Safety Guide SSG-23, International Atomic Energy Agency (IAEA), ISBN 978-92-0-128310-8: Vienna, 2012.

- /JESS 15/ Join Expert Speciation System: Joint Expert Speciation System. A powerful research tool for thermodynamic and kinetic modelling of chemical speciation in complex aqueous environments, Stand vom 21. Januar 2015, erreichbar unter http://jess.murdoch.edu.au/jess_home.htm, zitiert am 26. September 2016.
- /JON 29/ Jones, G., Dole, M.: The Viscosity of Aqueous Solutions of Strong Electrolytes with Special Reference to Barium Chloride, *Journal of the American Chemical Society*, Bd. 51, Nr. 10, S. 2950–2964, DOI 10.1021/ja01385a012, 1929.
- /KOC 12/ Kock, I., Eickemeier, R., Frieling, G., Heusermann, S., Knauth, M., Minkley, W., Navarro, M., Nipp, H.-K., Vogel, P.: Integritätsanalyse der geologischen Barriere. Bericht zum Arbeitspaket 9.1, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-286, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 301 S., ISBN 978-3-939355-62-5: Köln, 2012.
- /KOM 16/ Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe: Abschlussbericht der Kommission Lagerung hoch radioaktiver Abfallstoffe. Vorabfassung, K-Drs. 268, 681 S.: Berlin, 4. Juli 2016.
- /LAL 07/ Laliberté, M.: Model for Calculating the Viscosity of Aqueous Solutions, *Journal of Chemical & Engineering Data*, Bd. 52, Nr. 2, S. 321–335, DOI 10.1021/je0604075, 2007.
- /LAR 13/ Larue, J., Baltés, B., Fischer, H., Frieling, G., Kock, I., Navarro, M., Seher, H.: Radiologische Konsequenzenanalyse. Bericht zum Arbeitspaket 10, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-289, 267 S., ISBN 978-3-939355-65-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH: Köln, 2013.
- /LEI 92/ Leijnse, T.: Comparison of solution methods for coupled flow and transport in porous media. In: *Computational Methods in Water Resources IX. Two Volume Set*. Hrsg: Russell, T.F., Ewing, R.E., Brebbia, C.A., Gray, W.G., Pinder, G.F., S. 273–280, ISBN 978-1851668717, Springer, 1992.

- /LEN 98/ Lencka, M.M., Anderko, A., Sanders, S.J., Young, R.D.: Modeling Viscosity of Multicomponent Electrolyte Solutions, International Journal of Thermophysics, Bd. 19, Nr. 2, S. 367–378, DOI 10.1023/A:1022501108317, 1998.
- /MAS 05/ Massey, B.: Mechanics of Fluids, 8. Aufl., ISBN 0-415-36206-7, Taylor & Francis Groupe, LLC: London, New York, 2005.
- /MAY 16/ Mayer, K.-M., Moog, H.C., Seher, H.: Auswahl eines Ansatzes zur Bestimmung der Dichte in hochsalinaren Lösungen. Bericht zum Arbeitspaket 2. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-426, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-08-3: Köln, 2016.
- /MOO 07/ Moog, H.C., Keesmann, S.: Modellierung des reaktiven Stofftransports im Nahfeld eines Endlagers, GRS-225, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, ISBN 978-3-931995-99-7: Braunschweig, 2007.
- /MÜL 12/ Müller-Hoeppe, N., Breustedt, M., Czaikowski, O., Wieczorek, K., Wolf, J.W.: Integrität geotechnischer Barrieren – Teil 2, Vertiefte Nachweisführung. Bericht zum Arbeitspaket 9.2, Vorläufige Sicherheitsanalyse für den Standort Gorleben, GRS-288, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, 323 S., ISBN 978-3-939355-64-9: Köln, 2012.
- /NEA 12/ Organization for Economic Co-operation and Development - Nuclear Energy Agency: Methods for Safety Assessment of Geological Disposal Facilities for Radioactive Waste. Outcomes of the NEA MeSA Initiative, 239 S., ISBN 978-92-64-99190-3, 2012.
- /OSW 98/ Oswald, S.: Dichteströmungen in porösen Medien. Dreidimensionale Experimente und Modellierung. Dissertation, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich (ETH): Zürich, 1998.

- /PAR 13/ Parkhurst, D.L., Appelo, C.A.J.: Description of input and examples for PHREEQC version 3. A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations, U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A43, 497 S., U.S. Department of the Interior, U.S. Geological Survey: Denver, 2013.
- /PET 07/ Petersen, S., Hack, K.: The thermochemistry library ChemApp and its applications, Journal of Materials Research, Bd. 98, Nr. 10, S. 935–945, DOI 10.3139/146.101551, 2007.
- /PRU 99/ Pruess, K., Oldenburg, C., Moridis, G.: TOUGH2 User's Guide, Version 2.0, LBNL-43134, 198 S., Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL): Berkeley, California, USA, 1. November 1999, revised September 2012.
- /SEH 16/ Seher, H., Bracke, G., Weyand, T.: How to implement temperature-dependent Pitzer interaction coefficients into TOUGHREACT?, Goldschmidt Conference Abstracts, Nr. 2791: Yokohama, Japan, July 2016.
- /SKB 06/ Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Long-term safety for KBS-3 repository at Forsmark and Laxmar - a first evaluation. Main report of the SR-Can project, SKB Technical Report, TR-06-09, 620 S., Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB): Stockholm, Schweden, 1. Oktober 2006.
- /THO 14/ Thoenen, T., Hummel, W., Berner, U., Curti, E.: The PSI/Nagra Chemical Thermodynamic Database 12/07, PSI Bericht, Hrsg.: Paul Scherrer Institut (PSI), 14-04, 416 S.: Villingen, Switzerland, Dezember 2014.
- /THO 65/ Thomas, D.G.: Transport characteristics of suspension: VIII. A note on the viscosity of Newtonian suspensions of uniform spherical particles, Journal of Colloid and Interface Science, Nr. 20, S. 267–277, 1965.
- /UHL 16/ Uhlmann, S.: Vorgehensweisen bei der Szenarienentwicklung in der Nachverschlussphase von Endlagern in tiefen geologischen Formationen. Bericht zum Arbeitspaket 1. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-424, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-06-9: Köln, 2016.

- /VAN 84/ van der Vorst, J., Glasberg, P., Leijense, A., Praagman, N., Taat, J.:
Transport by groundwater of radionuclides released after flooding of a repository in a salt-dome, National Institute for Public Health and the Environment, Nr. 840424002, 1984.
- /WEI 16/ Weisbrod, N., Yechieli, Y., Shandalov, S., Lensky, N.: On the viscosity of natural hyper-saline solutions and its importance. The Dead Sea brines, Journal of Hydrology, Bd. 532, S. 46–51, DOI 10.1016/j.jhydrol.2015.11.036, 2016.
- /WEY 16a/ Weyand, T., Bracke, G., Seher, H.: Speziation von Radionukliden in Abfallgebunden für hoch radioaktive Abfälle, GRS-427, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-09-0, 2016.
- /WEY 16b/ Weyand, T., Kock, I.: Integritätsgefährdende Prozesse in internationalen Sicherheitskonzepten für die Wirtsgesteine Tonstein und Kristallin. Bericht zum Arbeitspaket 3. Weiterentwicklung des internationalen Stands von Wissenschaft und Technik zu Methoden und Werkzeugen für Betriebs- und Langzeitsicherheitsnachweise, GRS-428, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, ISBN 978-3-946607-10-6, 2016.

Abbildungsverzeichnis

- Abb. 2.1 Vergleich der berechneten relativen dynamischen Viskosität (Linien) mit experimentellen Messungen (Punkte) /LEN 98/ 13
- Abb. 2.2 Dynamische Viskosität der Essigsäure bei 15 (blau), 25 (grün) und 50 °C (rot). Linien stellen experimentelle und Symbole berechnete Daten dar /LAL 07/..... 15

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum
Boltzmannstraße 14
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de