

## Abstract

Tato práce se zabývá modelováním heterogenních katalytických reaktorů a je rozdělena do dvou částí.

První část se zabývá průmyslovým prototypem fluidního lože sloužícího jako generátor plynného vodíku na bázi endotermního rozkladu kyseliny mravenčí. Po počátečním určení fyzikálních a chemických vlastností reaktoru je odvozen systém devíti komponent, který je následně redukován na problém třífázového proudění. Pohyb pevných částic a bublin pohybujících se kapalinou je modelován pomocí Basset-Boussinesq-Ossen rovnice. Následným průměrováním pohybových rovnic odvodíme konečný systém ve tvaru třífázového Euler-Euler modelu. Na závěr první části práce se zabýváme numerickou simulací, porovnáním jejich výsledků s experimentem a CFD analýzou.

Druhá část práce pojednává o transportních procesech mezi katalytickými plochami a objemovou fází. Vhodnou volbou termodynamických potenciálů a identifikací objemové a povrchové produkce entropie obdržíme konstitutivní vztahy, které svou konstrukcí již automaticky splňují druhý zákon termodynamiky. Odvozený model je vhodný pro analýzu zahrnující adsorpční modely Langmuirova typu i jiné sorpční modely.

**Klíčová slova:** Heterogenní katalýza, vícefázové proudění, Euler-Euler model, fluidní lože, transportní jevy na fázovém rozhraní.