

ABSTRACT

The transition toward low-emission and fuel-flexible gas turbine technologies has intensified the need for accurate and computationally efficient combustion modelling, particularly for lean premixed systems operating near minimum compliance load (MCL). Under such conditions, increased carbon monoxide (CO) emissions and combustion instability become major challenges. While experimental studies and detailed-chemistry simulations provide valuable insights, they are often either too costly or computationally prohibitive for practical combustor design iterations. This thesis addresses these challenges by advancing the tabulated chemistry Flamelet Generated Manifold (FGM) approach within the open-source CFD platform OpenFOAM®, enabling high-fidelity prediction of flame dynamics and pollutant formation at a fraction of the computational cost.

A key focus of this work is improving the modelling of CO formation and burnout in lean premixed combustion, where slow post-flame CO oxidation, flame stretch, heat loss, and small-scale turbulence drive significant departures from equilibrium. To overcome limitations of the standard FGM framework—particularly its fast-chemistry assumption—several modelling enhancements are introduced. These include flame propagation effects, strained flamelet manifolds, non-adiabatic heat-loss modelling, a transport equation for CO, and a time-scale separation (TSS) approach for capturing the slower CO oxidation kinetics. Additionally, the solver is extended for partially premixed and non-premixed combustion through the inclusion of variance equations for turbulence–chemistry interaction (TCI) and a dual-mixture-fraction formulation suitable for multi-stream burners such as Sydney Flame L.

The developed solver is evaluated across a range of canonical and practical flame configurations, including Sandia Flame D, Sydney Flame L, a pulsed variant of Sydney Flame L, a steady swirl-stabilized premixed burner, and its pulsed counterpart. Results demonstrate that variance equations are essential for accurate modelling of non-premixed flames, while the enhanced FGM formulation successfully captures transient flame responses and dynamic behaviour under pulsed operation. For the swirl-stabilized premixed combustor, the integrated modelling approaches—accounting for wall heat loss, flame stretch, and CO oxidation time-scale effects—significantly improve CO prediction under lean conditions. An important contribution of the work is detailed sensitivity study on modelling parameters and assumptions, which is missing in literature for CO modelling. Furthermore, simulations of the pulsed swirl burner reveal the strong impact of periodic forcing on CO emissions due to localized

extinction–reignition cycles and unsteady flow–flame interactions, which has direct relevance for industrial combustion systems operating near MCL. The results demonstrate that rapid CO rise at low loads due to lean flames, which creates the MCL limit, can be potentially captured by incorporating effects of transient flame.

Overall, this thesis demonstrates that the extended FGM-based modelling framework provides a robust and computationally efficient tool for simulating complex premixed and partially premixed combustion systems. The enhanced OpenFOAM® solver developed herein offers valuable capabilities for predicting CO emissions, understanding large-scale unsteady dynamics, and supporting the design of next-generation low-emission gas turbine combustors.

सारांश

कम उत्सर्जन और ईंधन-लचीली गैस टरबाइन प्रौद्योगिकियों की ओर संक्रमण ने सटीक और गणनात्मक रूप से कुशल दहन मॉडलिंग की आवश्यकता को तीव्र कर दिया है, विशेष रूप से न्यूनतम अनुपालन भार (MCL) के निकट संचालित होने वाले लीन प्रीमिक्स सिस्टम के लिए। ऐसी परिस्थितियों में, कार्बन मोनोऑक्साइड (CO) उत्सर्जन में वृद्धि और दहन अस्थिरता प्रमुख चुनौतियाँ बन जाती हैं। यद्यपि प्रायोगिक अध्ययन और विस्तृत रसायन विज्ञान सिमुलेशन मूल्यवान अंतर्दृष्टि प्रदान करते हैं, वे अक्सर व्यावहारिक दहनक डिजाइन पुनरावृत्तियों के लिए या तो बहुत महंगे होते हैं या गणनात्मक रूप से अत्यावश्यक होते हैं। यह शोध प्रबंध ओपन-सोर्स CFD प्लेटफॉर्म OpenFOAM® के भीतर सारणीबद्ध रसायन विज्ञान फ्लेमलेट जनरेटेड मैनिफोल्ड (FGM) दृष्टिकोण को उन्नत करके इन चुनौतियों का समाधान करता है, जिससे गणनात्मक लागत के एक अंश पर लौ गतिशीलता और प्रदूषक निर्माण का उच्च-विश्वसनीयता पूर्वानुमान संभव हो पाता है।

इस कार्य का प्रमुख उद्देश्य लीन प्रीमिक्स दहन में CO निर्माण और दहन के मॉडलिंग में सुधार करना है, जहाँ धीमी पोस्ट-फ्लेम CO ऑक्सीकरण, फ्लेम स्ट्रेच, ऊष्मा हानि और लघु-स्तरीय अशांति संतुलन से महत्वपूर्ण विचलन उत्पन्न करती हैं। मानक FGM फ्रेमवर्क की सीमाओं—विशेष रूप से इसकी तीव्र-रसायन धारणा—को दूर करने के लिए, कई मॉडलिंग संवर्धन प्रस्तुत किए गए हैं। इनमें फ्लेम प्रसार प्रभाव, स्ट्रेन्ड फ्लेमलेट मैनिफोल्ड, गैर-एडियाबेटिक ऊष्मा हानि मॉडलिंग, CO के लिए एक परिवहन समीकरण और धीमी CO ऑक्सीकरण गतिकी को समझने के लिए एक टाइम-स्केल पृथक्करण (TSS) दृष्टिकोण शामिल हैं। इसके अतिरिक्त, अशांति-रसायन अंतःक्रिया (TCI) के लिए भिन्नता समीकरणों और सिडनी फ्लेम L जैसे मल्टी-स्ट्रीम बर्नर के लिए उपयुक्त दोहरे मिश्रण अंश सूत्रीकरण को शामिल करके सॉल्वर को आंशिक रूप से प्रीमिक्स और गैर-प्रीमिक्स दहन के लिए विस्तारित किया गया है।

विकसित सॉल्वर का मूल्यांकन सैंडिया फ्लेम डी, सिडनी फ्लेम एल, सिडनी फ्लेम एल के स्पंदित संस्करण, एक स्थिर भंवर-स्थिरीकृत प्रीमिक्स बर्नर और इसके स्पंदित समकक्ष सहित कई मानक और व्यावहारिक लौ विन्यासों पर किया गया है। परिणाम दर्शाते हैं कि गैर-प्रीमिक्स ज्वालाओं के सटीक मॉडलिंग के लिए विचरण समीकरण आवश्यक हैं, जबकि उन्नत एफजीएम सूत्रण स्पंदित संचालन के तहत क्षणिक ज्वाला प्रतिक्रियाओं और गतिशील व्यवहार को सफलतापूर्वक ग्रहण करता है। भंवर-स्थिरीकृत प्रीमिक्स कम्बस्टर के लिए, एकीकृत मॉडलिंग दृष्टिकोण - दीवार की ऊष्मा हानि, ज्वाला खिंचाव और सीओ ऑक्सीकरण समय-पैमाने के प्रभावों को ध्यान में रखते हुए - कम ईंधन खपत की स्थिति में सीओ पूर्वानुमान में उल्लेखनीय सुधार करते हैं। इस कार्य का एक महत्वपूर्ण योगदान मॉडलिंग मापदंडों और मान्यताओं पर विस्तृत संवेदनशीलता अध्ययन है, जो सीओ मॉडलिंग के लिए साहित्य में अनुपलब्ध है। इसके अलावा, पल्सड स्वर्ल बर्नर के सिमुलेशन से पता चलता है कि स्थानीय विलुप्तिकरण-पुनः प्रज्वलन चक्रों और अस्थिर प्रवाह-लौ अंतःक्रियाओं के कारण CO उत्सर्जन पर आवधिक बल का प्रबल प्रभाव पड़ता है, जो MCL के निकट संचालित औद्योगिक दहन प्रणालियों के लिए प्रत्यक्ष रूप से

प्रासंगिक है। परिणाम दर्शाते हैं कि कम भार पर लीन फ्लेम के कारण CO में होने वाली तीव्र वृद्धि, जो MCL सीमा का निर्माण करती है, को क्षणिक लौ के प्रभावों को शामिल करके संभावित रूप से नियंत्रित किया जा सकता है।

कुल मिलाकर, यह शोधपत्र दर्शाता है कि विस्तारित FGM-आधारित मॉडलिंग ढांचा जटिल प्रीमिक्स और आंशिक रूप से प्रीमिक्स दहन प्रणालियों के अनुकरण के लिए एक मजबूत और गणनात्मक रूप से कुशल उपकरण प्रदान करता है। इसमें विकसित उन्नत OpenFOAM® सॉल्वर CO उत्सर्जन की भविष्यवाणी करने, बड़े पैमाने पर अस्थिर गतिकी को समझने और अगली पीढ़ी के कम उत्सर्जन वाले गैस टरबाइन दहनकर्ताओं के डिजाइन में सहायता करने के लिए मूल्यवान क्षमताएं प्रदान करता है।