



República Federativa do Brasil
Ministério da Economia
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(11) BR 112017005960-6 B1



(22) Data do Depósito: 06/10/2015

(45) Data de Concessão: 24/08/2021

(54) Título: USO DE UMA COMPOSIÇÃO DE HIDROCARBONETO LÍQUIDA

(51) Int.Cl.: C10L 1/06; B60W 10/06.

(30) Prioridade Unionista: 06/10/2014 EP 14187819.9.

(73) Titular(es): SHELL INTERNATIONALE RESEARCH MAATSCHAPPIJ B.V..

(72) Inventor(es): CAROLINE NICOLA ORLEBAR; GLENN JOHN WILSON.

(86) Pedido PCT: PCT EP2015073026 de 06/10/2015

(87) Publicação PCT: WO 2016/055461 de 14/04/2016

(85) Data do Início da Fase Nacional: 23/03/2017

(57) Resumo: É provida uma composição de combustível líquida que é um uso adequado em um motor de ignição por centelha; a composição compreende uma mistura de hidrocarbonetos e apresenta uma pressão de vapor superior a cerca de 25 kPa e inferior a cerca de 50 kPa. A composição proporciona melhorias na economia de combustível 5 particularmente em veículos elétricos híbridos que compreendem um motor de combustão interna a gasolina como parte do grupo motopropulsor. São também providos métodos e usos das composições.

“USO DE UMA COMPOSIÇÃO DE HIDROCARBONETO LÍQUIDA”

Campo

[001] A invenção refere-se ao campo de formulações de combustível, particularmente formulações de combustível do tipo gasolina.

Fundamentos

[002] O aumento dos custos dos combustíveis à base de hidrocarbonetos e a crescente preocupação com os efeitos ambientais das emissões de dióxido de carbono resultaram em uma procura crescente por veículos motorizados que operam parcial ou totalmente com energia elétrica.

[003] Os veículos elétricos híbridos (HEV) utilizam tanto a energia elétrica armazenada em baterias recarregáveis como a energia mecânica convertida a partir de combustível, normalmente à base de hidrocarbonetos, através de um motor de combustão interna convencional (ICE). As baterias são carregadas durante a operação de acionamento pelo ICE e também pela recuperação da energia cinética durante a desaceleração e frenagem. Este processo é oferecido por uma série de fabricantes de equipamentos originais de veículos (OEMs) para alguns de seus modelos de veículos. Os HEVs proporcionam tipicamente uma experiência de acionamento normal, com a principal vantagem de um consumo de combustível melhorado em comparação apenas com veículos convencionais ICE. Os veículos elétricos híbridos plug-in (PHEVs) têm funcionalidade semelhante aos HEVs, mas nesta aplicação a bateria também pode ser conectada ao sistema elétrico da rede para recarregar quando o veículo estiver estacionado. PHEVs possuem tipicamente baterias maiores do que o HEV, que permite alguma capacidade de alcance totalmente elétrico. O acionamento dinâmico utilizará energia elétrica e ICE, embora a área de operação utilizando um motor de combustão interna (ICE) para propulsão possa ser restringida a cruzeiro e ao acionamento interurbano. Consequentemente, a demanda por combustível dos veículos pode muito bem ser diferente daquela requerida atualmente para veículos

convencionais ICE ou HEV equipados. Para os veículos baseados exclusivamente em um ambiente urbano, o aumento da capacidade de modo EV e função de carregamento plug-in reduzem ainda mais o nível de atividade ICE. Isto pode acarretar um tempo de permanência significativamente mais prolongado para conteúdos de tanque de combustível em comparação com veículos HEV e convencionais ICE.

[004] Veículos ICE convencionais fornecem uma faixa de aproximadamente 600 km (400 milhas) para um peso do sistema de propulsão de cerca de 200 kg e requerem um tempo de reabastecimento de cerca de 2 minutos. Comparativamente, considera-se que um pacote de bateria baseado na tecnologia LiON atual que poderia oferecer uma faixa comparável e vida útil da bateria, pesaria cerca de 1700 kg. O peso adicional do motor, componentes eletrônicos e chassi do veículo resultariam em um veículo muito mais pesado do que o equivalente convencional ICE.

[005] Em um veículo convencional ICE, o binário do motor e a potência fornecida pelo motor devem cobrir toda a gama de dinâmicas de funcionamento do veículo. Contudo, a eficiência termodinâmica de uma combustão interna não pode ser totalmente otimizada através de uma ampla gama de condições de funcionamento. O ICE tem um intervalo dinâmico relativamente estreito. Por outro lado, as máquinas elétricas podem ser concebidas para terem uma gama dinâmica muito ampla, por exemplo, elas são capazes de fornecer torque máximo em velocidade zero. Esta flexibilidade de controle é bem reconhecida como uma característica útil em aplicações de acionamento industrial e oferece potencial em aplicações automotivas. Dentro desses limites de operação, as máquinas elétricas podem ser controladas usando componentes eletrônicos sofisticados para fornecer um débito de binário muito suave, adaptados às exigências da demanda. No entanto, pode ser possível fornecer perfis de débito de binário diferentes que sejam mais atraentes para condutores. Por conseguinte, é provável que esta seja uma área

de interesse para os engenheiros projetistas automotivos. Em velocidades mais elevadas, os sistemas de acionamento elétrico tendem a ser limitados pela capacidade de rejeição de calor dos componentes eletrônicos de potência e pelo sistema de resfriamento para o próprio motor elétrico. Considerações adicionais para motores de alto torque a altas velocidades estão associadas com a massa dos componentes rotativos, onde podem ser produzidas forças centrífugas muito altas a elevadas velocidades. Estes podem ser destrutivos. Em HEVs e PHEVs, o motor elétrico é consequentemente capaz de fornecer somente um pouco da escala dinâmica. No entanto, isto pode permitir que a eficiência do ICE seja otimizada em uma gama mais estreita de funcionamento. Isto oferece algumas vantagens em termos de concepção do motor.

[006] Assim, os combustíveis de hidrocarbonetos atuais desenvolvidos para uma gama completa de ICE não podem ser otimizados ou efetivamente benéficos para unidades de HEV ou PHEV ICE. Os combustíveis foram formulados e regulados para veículos convencionais ICE por muitos anos e, portanto, podem ser considerados como estabilizados, com graus de liberdade no espaço de formulação bem entendido. A introdução relativamente recente da tecnologia híbrida apresenta uma oportunidade para considerar o espaço de formulação de combustível a partir de uma perspectiva inteiramente nova.

Descrição resumida da invenção

[007] A invenção refere-se à descoberta de que para veículos elétricos híbridos (HEVs), e PHEVs em particular, um combustível de baixa pressão de vapor não havia comprometido a capacidade de partida a frio, também mostrou melhora no consumo de combustível e potência.

[008] Um primeiro aspecto da invenção provê uma composição de combustível líquido adequada para utilização em um motor de ignição por centelha, compreendendo a composição uma mistura de hidrocarbonetos e

sendo que a composição exibe uma pressão de vapor superior a cerca de 25 kPa e abaixo de cerca de 50 kPa. Em concretizações específicas da invenção, a composição de combustível exibe uma pressão de vapor inferior a 45,0 kPa, adequadamente abaixo de 42,5 kPa, ou opcionalmente abaixo de 40,0 kPa. De acordo com uma modalidade da invenção, a composição de combustível é uma gasolina.

[009] Em um segundo aspecto, a invenção proporciona um método de operação de um motor de combustão interna de ignição por centelha compreendendo o funcionamento do motor de combustão interna utilizando uma composição de combustível líquido, compreendendo uma mistura de hidrocarbonetos e sendo que a composição exibe uma pressão de vapor superior a cerca de 25 KPa e abaixo de cerca de 50 kPa. Em uma modalidade específica da invenção, o motor de combustão interna de ignição por centelha está compreendido dentro do grupo motopropulsor de um veículo elétrico híbrido (HEV), opcionalmente o veículo elétrico híbrido é um veículo elétrico híbrido de encaixe (PHEV). Adequadamente, a composição de combustível exibe uma pressão de vapor inferior a 45,0 kPa, adequadamente abaixo de 42,5 kPa, ou opcionalmente abaixo de 40,0 kPa.

[0010] Um terceiro aspecto da invenção proporciona uma utilização de uma composição de hidrocarboneto líquido que apresenta uma pressão de vapor superior a 25 kPa e inferior a 50 kPa como combustível para motores de combustão interna de ignição por centelha. Adequadamente, o motor de combustão interna de ignição por centelha está compreendido dentro do grupo motopropulsor de um veículo elétrico híbrido ou, opcionalmente, um veículo elétrico híbrido plug-in.

[0011] Um quarto aspecto da invenção proporciona uma utilização de uma composição de hidrocarboneto líquida que apresenta uma pressão de vapor superior a cerca de 25 kPa e inferior a cerca de 50 kPa para melhorar o consumo de combustível em um veículo elétrico híbrido ou, opcionalmente,

um veículo elétrico plug-in.

Desenhos

[0012] As modalidades da invenção são ilustradas pelos desenhos anexos, nos quais a Figura 1 mostra um gráfico de barras que fornece os resultados de um teste comparativo quanto ao consumo de combustível em três velocidades de marcha entre dois combustíveis (combustíveis A e B) executado em um carro equipado ICE convencional.

[0013] A Figura 2 mostra um gráfico de barras que fornece os resultados de um teste comparativo quanto ao consumo de combustível em três velocidades de marcha entre dois combustíveis (combustíveis A e B) realizado em um veículo equipado PHEV.

Descrição Detalhada

[0014] A presente invenção provê uma composição de combustível modificada para PHEVs e HEVs que compreende menos componentes voláteis, exibindo assim uma pressão de vapor mais baixa do que a especificada atualmente para veículos ICE de ignição por centelha convencionais. O termo "compreende" tal como aqui utilizado pretende indicar que, como nível mínimo estão incluídos os componentes mencionados, mas que outros componentes que não estão especificados também podem ser igualmente incluídos.

[0015] Sem estar ligado à teoria, acredita-se que as descobertas dos inventores podem ser resultado do fato de componentes mais leves e mais voláteis de combustíveis de gasolina serem menos críticos para o desempenho de partida a frio em HEVs, pois a energia elétrica pode ser utilizada para auxiliar a vaporização do combustível para a partida inicial do ICE. Com efeito, para os PHEV em que se prevê que uma proporção considerável de trajetos seja completada utilizando apenas energia elétrica, o tempo de permanência dos combustíveis no tanque pode ser prolongado, resultando em algumas perdas em "frações voláteis" Reduzindo o teor de voláteis de um

combustível, a presente invenção proporciona uma econômica considerável uma vez que as formulações de combustível para HEV e PHEV não requerem os componentes de fração volátil mais caros. Isto também permite uma melhor utilização dos recursos de hidrocarbonetos onde os componentes voláteis mais leves e valiosos podem ser retirados do uso de combustível e direcionados para processos químicos sintéticos. Além disso, a invenção provê uma composição de combustível mais estável em termos de composição o que não muda consideravelmente em termos de teor de hidrocarboneto ao longo do tempo.

[0016] Os combustíveis de hidrocarboneto líquidos adequados do intervalo de ebulição da gasolina são misturas de hidrocarbonetos com um intervalo de ebulição de cerca de 25°C a cerca de 232°C, contudo, tendo em conta o teor reduzido de voláteis, as composições de combustível da invenção podem exibir um ponto de ebulição inicial (IBP) maior do que o esperado do que aquele de uma mistura de gasolina formulada convencionalmente. Em uma modalidade específica da invenção, o IBP é pelo menos 30°C, opcionalmente pelo menos 33°C, adequadamente pelo menos 35°C. Em uma concretização específica da invenção, a composição de combustível IBP é superior a 38°C.

[0017] As composições de combustível da invenção compreendem misturas de hidrocarbonetos saturados, hidrocarbonetos olefínicos e hidrocarbonetos aromáticos. São preferidas misturas de gasolina com um teor de hidrocarbonetos saturados que variam de cerca de 40% a cerca de 80% em volume, adequadamente em excesso de 50% em volume, um teor de hidrocarboneto olefínico de 0% a cerca de 30% em volume e um teor de hidrocarboneto aromático de cerca de 10% a cerca de 60% em volume. O combustível de base é derivado de gasolina de destilação direta, gasolina polimérica, gasolina natural, dímero e olefinas trimerizadas, misturas de hidrocarbonetos aromáticos produzidos sinteticamente ou de reservas de

petróleo craqueado cataliticamente ou craqueado termicamente e misturas destes. O nível de octano, $(RON + MON) / 2$, é geralmente acima de cerca de 85. As bases convencionais de combustíveis para motores podem ser empregadas na prática da presente invenção. Por exemplo, os hidrocarbonetos na gasolina podem ser substituídos por até uma quantidade substancial de álcoois ou éteres convencionais, convencionalmente conhecidos para utilização em combustíveis. Os combustíveis de base são desejavelmente substancialmente isentos de água, uma vez que a água poderia impedir uma combustão suave.

[0018] Normalmente, as misturas de combustível de hidrocarboneto às quais a invenção é aplicada são substancialmente isentas de chumbo, mas podem conter quantidades menores de agentes de mistura tais como metanol, etanol, éter etil-terc-butilico, éter metil-terc-butilico, éter terc-amil metílico e similares, de cerca de 0,1% em volume a cerca de 15% em volume do combustível de base, embora possam ser utilizadas quantidades maiores. Os combustíveis também podem conter aditivos convencionais incluindo antioxidantes tais como fenólicos, por exemplo, 2,6-di-tertbutilfenol ou fenilenodiaminas, por exemplo, N, N'-di-sec-butil-p-fenilenodiamina, corantes, desativadores de metais, agentes redutores de turbidez tais como resinas de alquilfenol-formaldeído etoxiladas de tipo poliéster. Inibidores de corrosão, tais como um éster de álcool poli-hídrico de um derivado de ácido succínico tendo em pelo menos um dos seus átomos de carbono alfa um grupo hidrocarboneto alifático não substituído ou substituído tendo de 20 a 50 átomos de carbono, por exemplo, diéster de pentaeritritol de ácido succínico poli-isobutileno-substituído, o grupo poli-isobutileno tendo um peso molecular médio de cerca de 950, em uma quantidade de cerca de 1 ppm (partes por milhão) em peso até cerca de 1000 ppm em peso.

[0019] As composições de combustível da invenção são caracterizadas por ter uma menor volatilidade em comparação com

combustíveis de especificação padrão, por exemplo, combustíveis que satisfazem a especificação EN228. Em outras palavras, os combustíveis da invenção compreendem menos componentes voláteis e, deste modo, exibem uma pressão de vapor mais baixa quando comparada com as misturas de combustível de gasolina padrão convencionais. A pressão de vapor aceitável (kPa) de gasolinas que satisfazem o padrão de combustível EN228 situa-se entre 45,0 kPa e 110,0 kPa. De acordo com uma modalidade da presente invenção, a composição de combustível exibe uma pressão de vapor abaixo de cerca de 50,0 kPa, adequadamente abaixo de 45,0 kPa, mais adequadamente abaixo de 42,5 kPa e opcionalmente abaixo de 40,0 kPa. Em uma concretização específica da invenção, a gasolina apresenta uma pressão de vapor de cerca de 38 kPa. Tipicamente, a gasolina da presente invenção apresenta uma pressão de vapor não inferior a cerca de 25 kPa adequadamente não inferior a 27,5 kPa, mais adequadamente pelo menos 30 kPa, opcionalmente pelo menos 32,5 kPa, mais opcionalmente pelo menos 35 kPa. O termo "cerca de" quando aplicado a um determinado valor é entendido como englobando variações dentro de uma margem de erro razoável ou em uma extensão em que valores de um e outro lado do valor indicado que demonstra um alto nível de equivalência funcional, também estão incluídos.

[0020] Uma vantagem da presente invenção é que a exigência de utilizar componentes menos voláteis na mistura de combustível significa que o teor de isoparafina pode ser aumentado acima de um nível normalmente associado a composições de gasolina. Em uma modalidade específica da invenção, o teor de isoparafina pode ser superior a 35% em volume, adequadamente superior a 40% em volume e, opcionalmente, superior a 42% em volume, em que o volume se refere ao volume total da composição de combustível. Ao aumentar a utilização de isoparafinas em relação às n-parafinas, as composições de gasolina da invenção também demonstrarão uma RON mais elevada, exigindo assim menos componentes aditivos para

aumento de índice de octanas caros a serem adicionados.

[0021] A invenção será descrita a seguir por referência ao seguinte exemplo não limitativo.

Exemplo

[0022] O presente exemplo testa a capacidade de partida a frio, o consumo de combustível, a potência de saída e o desempenho de aceleração em um PHEV em comparação com um veículo ICE convencional. Os exemplos utilizam gasolina padrão compatível com EN 228 (Combustível A - comparativo) versus uma composição de gasolina de teste (Combustível B – de teste) que foi ajustada para mostrar uma menor volatilidade em relação à gasolina padrão EN 228. As propriedades dos combustíveis comparativos e de teste são apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1 de propriedades de combustível

		Especificação EN228		Comparação combustível A	Experimento combustível B
		Min	Max		
RON	-	95	-	96,5	96,1
MON	-	85	-	85,4	86,5
Densidade a 15°C	g/cm ³	0,720	0,775	0,7390	0,7523
IBP	°C	-	-	26,0	39,9
FBP	°C	-	210,0	200,9	192,3
E70	% vol	20,0	48,0	33,5	11,8
E100	% vol	46,0	71,0	52,9	45,6
E150	% vol	75,0	-	84,9	88,6
VP	kPa	45,0	110,0	94,9	38,3
GC					
C	-	-	-	6,48	7,03
H	-	-	-	11,64	12,66
O	-	-	-	0,00	0,00
C	%m	-	-	87,00	86,95
H	%m	-	-	13,02	13,05
O	%m	-	2,7 ou 3,7	0,00	0,00
Parafinas	% vol	-	-	12,28	7,73
Isoparafinas	% vol	-	-	33,52	44,30
Olefinas (incl. dienos)	% vol	-	-	15,21	7,87
Dienos	% vol	-	-	0,13	0,02
Naftenos	% vol	-	-	3,07	4,16
Aromáticos	% vol	-	-	34,62	34,91
Oxigenatos	% vol	-	-	0,00	0,00
Elementos desconhecidos	% vol	-	-	1,30	1,03
Total	% vol	-	-	100,0	100,0
AFR (estequiometria)	-	-	-	14,46	14,46
Gr. Ent. Com (g)	MJ/kg	-	-	-43,30	-42,89
Vol. Ent. Com. (g)	MJ/L	-	-	-31,9987	-32,2661
Gr. Ent. Com. (l)	MJ/kg	-	-	-43,000	-43,258
Vol. Ent. Com. (l)	MJ/L	-	-	-31,777	-32,543

		Especificação EN228		Comparação combustível A	Experimento combustível B
		Min	Max		
Calor de vaporização	MJ/kg	-	-	0,371	-0,370
Razão Cal. H/C	-	-	-	1,796	1,80
Razão Cal. O/C	-	-	-	0,000	0,000
CWF	-	-	-	0,8690	0,8687

[0023] O combustível de referência (combustível A) era uma gasolina sem chumbo padrão com uma qualidade de octano de RON 96,5 que satisfazia a especificação EN228 atual e era semelhante a um combustível convencional de gasolina de alta octanagem. Este combustível serviu de base para comparação. O combustível de teste (combustível B) representava um combustível PHEV "armazenado". Tinha uma qualidade de octano adequada de RON 96,1, mas suas métricas de volatilidade E70, E100 e VP estavam abaixo da especificação EN228 atual.

Veículos

[0024] Um HEV Toyota Prius 1.5 T4 2008 que foi convertido pela Amberjac TM para ter capacidade de carga de encaixe foi selecionado para teste como um PHEV representativo. Isto foi comparado a um Golf 1.6 FSI Volkswagen padrão 2004 alimentado por ignição de centelha convencional, injeção direta de combustível, tecnologia de motor de combustão interna (ICE). Os ICEs em ambos os veículos operaram utilizando-se um ciclo de quatro tempos com temporização de válvula variável.

Teste de partida a frio

[0025] As condições de teste para partida a frio estão indicadas na tabela 2.

Tabela 2 Teste de Partida a Frio

Teste	Definição
Aquecimento pré-partida	Cruise 30 min 100 km/h Top-1 RLS, combustível de tanque (Std ULG95 -alta octanagem)
Combustível selecionado	Conectar combustível de teste a linhas externas de combustível
Purga	5 litros de descarga com combustível de teste, Cruise 30-mins 100 km/h Top-1 RLS
Impregnação	Impregnação O/noite a 5° C em CD5 Combustível a ser impregnado durante a noite em célula.
Partida a frio	Registro de teste de craqueamento a frio: Vbatt/tempo, No. tentativas Max 5 tentativas

[0026] Contrariamente às expectativas, o combustível B não apresentou problemas de partida a frio a 5° C quando utilizado no motor PHEV ou no motor ICE.

Avaliação de desempenho

[0027] Uma consideração importante para formulações de combustível é o potencial para quaisquer benefícios ou desvantagens de desempenho derivados de combustíveis. Estes são mais frequentemente determinados pelo funcionamento do veículo (ou motor) a plena carga durante a aceleração e / ou condições de estado constante. As condições para avaliar o desempenho da aceleração e também a potência são apresentadas na tabela 3

Tabela 3 Teste de desempenho

Teste	Definição
Aquecimento pré-partida	100 km/h, trânsito em estrada, 15 minutos, tanque de combustível
Combustível selecionado	Conectar combustível de teste a linhas de combustível externas
Purga/Precon	Cruise, acionamento ou Top-1, 90 km/h, trânsito em estrada, 15mins 5x WOT Accel em acionamento ou Top-1, 50-100 km/h
Teste de aceleração	5x WOT no modo de acionamento ou Top-1 30-50 km/h* 50-80 km/h 80-120 km/h
Teste de potência	WOT a 50, 80, 120 km/h em acionamento ou Top-1 5s estabilização, 5s medição Pausa 60 s ocioso Repetir duas vezes (três medições em cada etapa) registro, potência (kW), força trativa (N), velocidade (km/h dyno)

[0028] Quando utilizado no ICE e no PHEV o combustível de teste B resultou em um consumo de combustível consistentemente melhorado em todas as velocidades de cruzeiro (ver Figuras 1 e 2). Deve notar-se que o consumo de combustível no PHEV a uma velocidade de 50 km/h é indicado como zero porque o veículo estava operando unicamente sob energia elétrica a esta velocidade (ver Figura 2).

[0029] Surpreendentemente, verificou-se que o combustível B apresentou mais de 1% de melhoria no consumo de combustível em um estado constante (120 km / h) em comparação com o combustível comparativo padrão (combustível A) quando utilizado no PHEV. Isto é

significativo porque a esta velocidade o PHEV está operando somente usando seu ICE. Ainda mais surpreendente foi que o consumo de combustível reduzido no veículo ICE a 120 km / h foi ainda mais elevado em pouco menos de 3% (ver Figura 1)

[0030] As tabelas seguintes descrevem os resultados para o ciclo de acionamento europeu de arranque a frio (NEDC) e o estado de arranque a quente a 120 km / h, juntamente com uma previsão teórica baseada no conhecimento geral comum antes dos ensaios serem realizados.

Tabela 4

	Consumo de combustível comparado ao combustível comparativo	
	PHEV	ICE
Previsão	Sem alteração	Sem alteração
Resultado NEDC	Melhor por 4.4%	Melhor por 2.4%
Resultado 120 km/h	Melhor por 1.2%	Melhor por 2.8%

[0031] Os resultados mostram que a utilização de um combustível de baixa pressão de vapor não foi desvantajosa para nenhum dos veículos e mostrou alguns benefícios para a economia de combustível. Por conseguinte, a invenção proporciona a utilização de combustíveis com pressões de vapor inferiores às especificadas em normas internacionais estabelecidas (por exemplo EN228) em ICEs em geral e mais adequadamente dentro de ices compreendidos dentro do grupo motopropulsor de um veículo elétrico híbrido.

[0032] Embora modalidades particulares da invenção tenham sido aqui reveladas em pormenor, isto tem sido feito a título de exemplo e apenas para fins ilustrativos. As modalidades acima mencionadas não se destinam a ser limitativas em relação ao âmbito das reivindicações anexas. Os inventores consideram que é possível realizar diversas variantes, alterações e modificações à invenção sem se afastarem do espírito e do âmbito da invenção tal como definido pelas reivindicações.

REIVINDICAÇÕES

1. Uso de uma composição de hidrocarboneto líquida, caracterizado pelo fato de que exibe uma pressão de vapor superior a 25 kPa e inferior a 50.0 kPa para melhorar o consumo de combustível em um veículo elétrico híbrido plug-in.

Fig.1

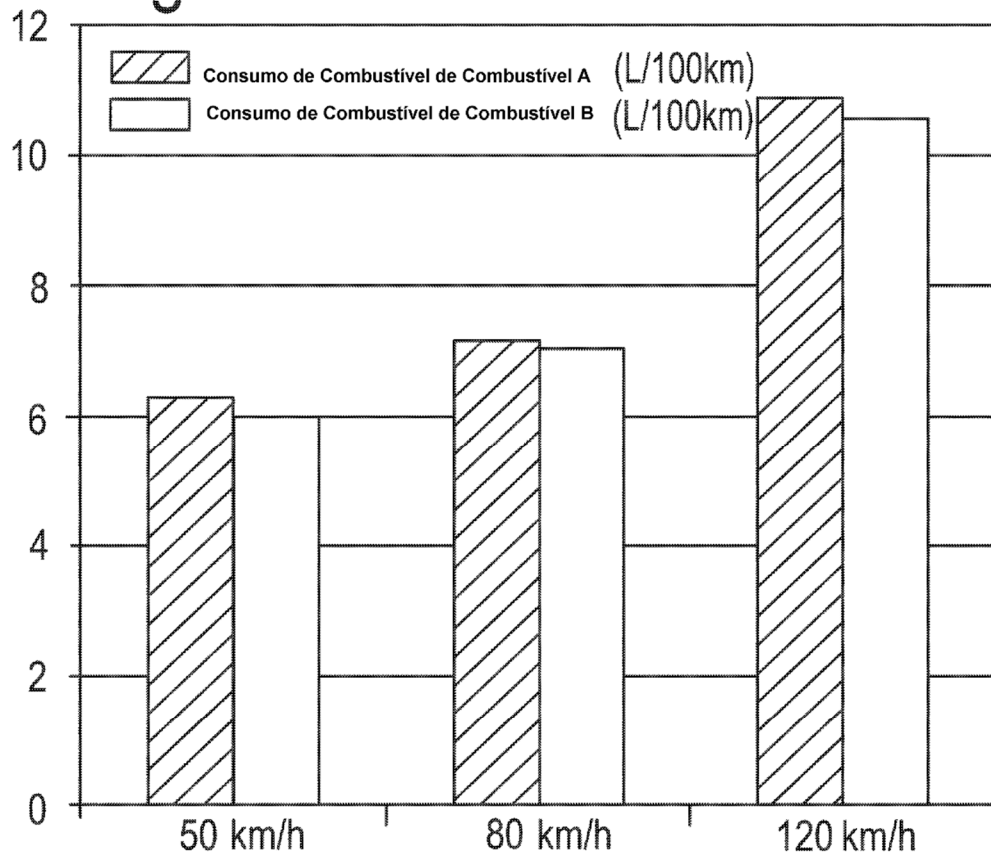


Fig.2

