

Título del proyecto:

Herramientas web avanzadas para la promoción de la aplicación de la nanotecnología y el uso seguro de nanomateriales en el sector plástico.

Acrónimo del Proyecto: **NanoDesk**

Código del Proyecto: **SOE1/P1/E0215**

Título del Informe:

E. A1c Sistema para la toma de decisiones basado en análisis multicriterio (MCDA)

Coordinador y responsable del Documento:

ITENE

Fecha de redacción:

04/2017

05/2017

Clasificación del entregable:

RESTRINGIDA

Acción	A1.3	Periodo	Marzo 2017
Principales tareas relacionadas:	A.1.3		

RESUMEN EJECUTIVO

El objetivo de la actividad A1.3 es el desarrollo de una herramienta capaz de apoyar la identificación y selección de los nanomateriales artificiales (Engineered Nanomaterials o ENMs, en inglés) más adecuados al empleo en el sector del plástico, para mejorar las propiedades específicas del compuesto. La herramienta, que está disponible tanto en formato Microsoft Excel como de aplicación web multilingüe, consiste en un sistema de toma de decisiones basado en análisis multicriterio. Las variables más significativas que determinan si un nanomaterial es adecuado para un uso o aplicación específicos han sido identificados (criterios de selección) y cuantificados, estableciendo una jerarquía y asignándoles una puntuación. Este sistema de criterios se ha implementado en una aplicación Microsoft EXCEL con el uso del lenguaje de programación Visual Basic (VB), y como aplicación web disponible para los usuarios interesados en la plataforma online de NanoDesk.

LISTA DE ACRÓNIMOS

- ENM:** Engineered Nanomaterial (nanomaterial artificial)
MCDA: Multi-Criteria Decision Analysis (análisis multicriterio)
VB: Visual Basic

TABLA DE CONTENIDOS

RESUMEN EJECUTIVO	2
LISTA DE ACRÓNIMOS	3
TABLA DE CONTENIDOS.....	4
LISTA DE TABLAS	5
LISTA DE FIGURAS	5
1. OBJETIVO DE LA HERRAMIENTA	6
2. ANÁLISIS MULTICRITERIO	6
2.1. ¿En qué consiste?	6
2.2. Las alternativas	7
2.3. Determinación de los criterios de selección y de la jerarquía	7
2.4. Sistema de puntuación y pesos relativos	8
3. LA HERRAMIENTA MICROSOFT EXCEL	12
4. LA VERSIÓN WEB DE LA HERRAMIENTA	14
5. CONCLUSIONES.....	16

LISTA DE TABLAS

<i>Tabla 1: Lista de las alternativas consideradas en el proceso de toma de decisiones.</i>	7
<i>Tabla 2: Selección de los principales criterios considerados en el análisis multicriterio.</i>	8
<i>Tabla 3: Factores secundarios incluidos en el sistema de toma de decisiones.</i>	8
<i>Tabla 4: Sistema de evaluación relativo a los criterios principales considerado. A un color más oscuro corresponde una mejor calidad y, de consecuencia, una puntuación más alta.</i>	9
<i>Tabla 5: Sistema de evaluación relativo a los criterios secundarios considerados. A un color más oscuro corresponde una mejor calidad y, de consecuencia, una puntuación más alta.</i>	11

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 1: Representación esquemática del sistema de puntuación aplicado.</i>	9
<i>Figura 2: La herramienta para la toma de decisiones de NanoDESK.</i>	13
<i>Figura 3: Ejemplo de lista de resultados proporcionada por la herramienta.</i>	14

1. OBJETIVO DE LA HERRAMIENTA

El proyecto SUDOE NanoDesk se centra en la promoción de la nanotecnología como instrumento fundamental para el desarrollo de nuevos materiales plásticos. Los estudios han demostrado cómo la presencia de nanomateriales proporciona a ciertos compuestos químicos nuevas propiedades de alto valor añadido con respecto al mismo material en su forma original, o permite mejorar las propiedades ya existentes. Sin embargo, en la selección del nanomaterial más apropiado que se va a emplear en un producto específico, no sólo deben considerarse los beneficios en términos de propiedades adquiridas o mejoradas, sino también los riesgos potenciales que representa tanto para la salud humana como para el medio ambiente.

El objetivo principal del proyecto es el desarrollo de una plataforma web destinada a fomentar la difusión en el mercado y la aplicación de nanocompuestos, así como a actuar como estructura de transferencia de conocimiento. La idea es dotar al mercado plástico de un instrumento capaz de garantizar la calidad de los polímeros nanoestructurados producidos, garantizar la protección de la salud humana y del medio ambiente y fomentar la demanda de productos con propiedades añadidas en el sector plástico, incrementando la investigación y la competitividad.

La acción A1.3 se enmarca en este ámbito y tiene como objetivo la construcción de un sistema de toma de decisiones para ayudar a las empresas del sector plástico en la selección del nanomaterial más apropiado a utilizar según sus necesidades. Pues, se ha diseñado una aplicación Microsoft EXCEL utilizando el lenguaje Visual Basic (VB) basada en un análisis de decisiones multicriterio (MCDA). La selección del nanomaterial adecuado está influenciada por diferentes factores o variables. Los beneficiarios de nuestra herramienta son todos aquellos empresarios interesados en entrar en contacto con el mundo de la nanotecnología aplicada a los productos del sector plástico o deseosos de saber más sobre las opciones disponibles en el mercado.

Una vez abierta la herramienta, el usuario seleccionará el sector industrial al que pertenece y la propiedad que quiere mejorar o conferir al producto mediante el uso de nanomateriales. Sin embargo, diferentes factores pueden influir en la selección, como el precio, la disponibilidad en el mercado y la peligrosidad de la sustancia, todos aspectos gestionados directamente por la herramienta. Estos factores constituyen el punto de partida para definir un conjunto de criterios de selección específicos que la aplicación cuantifica, estableciendo una jerarquía y asignando una puntuación a cada sustancia considerada, y sugiriendo al final las mejores opciones para el sector industrial y producto seleccionado.

Más detalles sobre las sustancias incluidas, los criterios de selección y el sistema de puntuación se pueden encontrar en las siguientes secciones, juntos a una descripción completa de las herramientas Excel y web.

2. ANÁLISIS MULTICRITERIO

2.1. ¿En qué consiste?

El análisis de decisiones multicriterio, o MCDA, es una valiosa herramienta que se puede aplicar a muchas situaciones complejas. Es especialmente apropiado para resolver problemas que se caracterizan como una elección entre alternativas. El propósito común de estos métodos es evaluar y elegir entre varias alternativas utilizando un análisis sistemático de diferentes criterios para superar las limitaciones de las tomas de decisiones individuales o de grupo no estructuradas.

Estos métodos suelen proceder a través de los siguientes pasos:

1. Definición del problema/situación inicial basándose en los inputs de las partes interesadas;
2. Generación de las alternativas mediante la ayuda de las partes interesadas, incluyendo los expertos del sector considerado;
3. Formulación de criterios y sub-criterios mediante los cuales se valoran las alternativas, y desarrollo de jerarquías basadas en el juicio de las partes interesadas;
4. Recolección de información para establecer la importancia relativa de los criterios, es decir establecer los pesos relativos de los diferentes criterios en el proceso de toma de decisiones;
5. Selección sistemática de las alternativas apropiadas mediante la especificación de algoritmos bien definidos utilizando puntuaciones de criterios y pesos

2.2. Las alternativas

En la Tabla 1 se enumeran los posibles nanomateriales que pueden usarse como relleno para la matriz polimérica, que constituyen las alternativas en nuestro método MCDA. Más detalles sobre las razones de esta selección se pueden encontrar en el Entregable A1a.

Tabla 1: Lista de las alternativas consideradas en el proceso de toma de decisiones.

Nombre	Fórmula
Dióxido de titanio	TiO ₂
Óxido de zinc	ZnO
Dióxido de silicio	SiO ₂
Óxido de cobre	CuO
Óxido de aluminio	Al ₂ O ₃
Plata	Ag
Nanoarcillas	-
Negro de humo	C
Grafeno	C
Fullereno	C
Nanotubos de carbón de pared simple	C
Nanotubos de carbono multi-pared	C
Oro	Au
Carbonato de calcio	CaCO ₃

2.3. Determinación de los criterios de selección y de la jerarquía

La elección del nanomaterial apropiado para su uso en un sector industrial específico o para un producto en particular puede verse afectada por un gran número de variables, tanto sobre el papel de la sustancia en el mercado como sobre su peligrosidad. Los principales criterios de selección que elegimos pertenecen a ambas clases y se enumeran en la Tabla 2.

Tabla 2: Selección de los principales criterios considerados en el análisis multicriterio.

Criterios principales:
Toxicidad por inhalación
Toxicidad en agua dulce (Daphnia)
Producción anual en Europa (toneladas/año)
Precio (€/kg)
Toxicidad en agua dulce (Peces)
Toxicidad oral

A este grupo pertenece la toxicidad por inhalación, la vía más probable de exposición para los seres humanos, y la peligrosidad del material para Daphnias y peces, las especies acuáticas más sensibles a la contaminación del agua, ya que queremos que las empresas del sector plástico hagan un uso seguro de los nanomateriales. Sin embargo, queremos que nuestro enfoque a la industria sea realista y que considere las necesidades de los diferentes grupos de interés. Por lo tanto, hemos incluido en los criterios principales también el precio del material y su disponibilidad en el mercado, ya que nuestro objetivo es proporcionar a la industria del plástico soluciones asequibles y fáciles de adoptar.

En la Tabla 3 se muestra una lista de factores secundarios que influyen en la selección del nanomaterial, y que se tienen en cuenta en el sistema MCDA. Entre ellas, las otras vías, menos probables, de exposición a ENMs para seres humanos.

Tabla 3: Factores secundarios incluidos en el sistema de toma de decisiones.

Factores secundarios:
Toxicidad dérmica
Genotoxicidad
Citotoxicidad
Toxicidad para la reproducción
Toxicidad en agua dulce (Algas)
Toxicidad en el suelo (Lombrices)

Dentro de cada criterio o factor es posible elegir, para cada sustancia, entre cinco niveles cualitativos diferentes (muy alto, alto, medio, bajo, muy bajo) más la opción "no clasificado" en caso de que la información no esté disponible en literatura (véase la y la).

2.4. Sistema de puntuación y pesos relativos

Los criterios anteriores se utilizan para asignar una puntuación a los nanomateriales que incluimos en nuestra herramienta MCDA.

El sistema de puntuación que aplicamos está representado esquemáticamente en la Figura 1. Los criterios principales determinan el 90% de la puntuación, mientras que el 10% restante viene dado

por los criterios secundarios. Cada criterio, sea principal o secundario, tiene su propio peso. En el caso de los criterios principales, los pesos se han asignado sobre la base de la siguiente lista de prioridades:

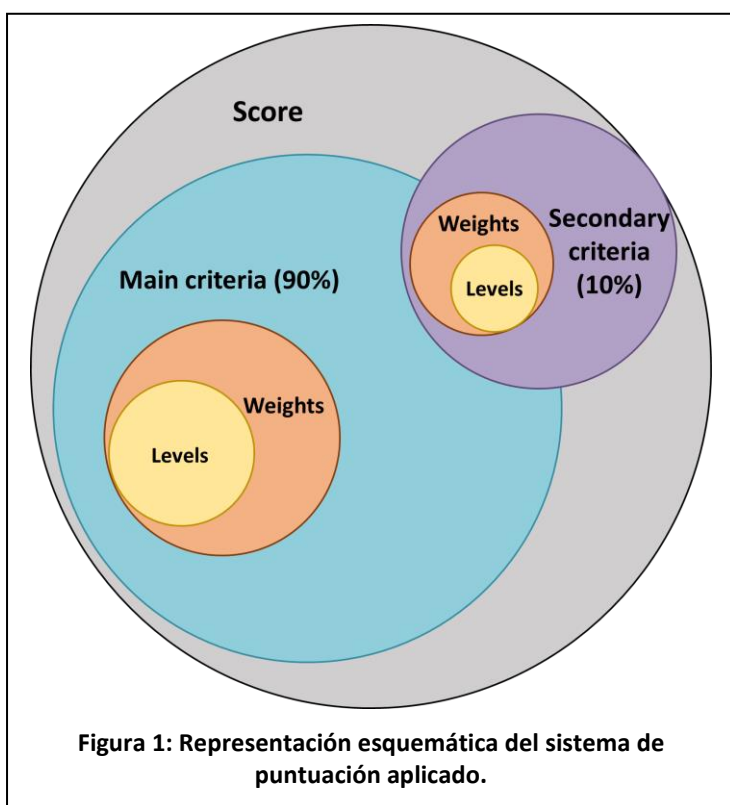
- salud humana;
- seguridad ambiental;
- asequibilidad del producto,

y teniendo en cuenta que la suma de los pesos debe devolver uno. A los criterios secundarios se les ha asignado la misma importancia, es decir que el peso asignado es simplemente un factor 1/6.

Dentro de cada criterio, se han definido diferentes niveles y se han establecido las puntuaciones correspondientes a cada uno de ellos. Estos puntajes van de 0 a 90 en el caso de los criterios principales, y de 0 a 10 en el caso de los

secundarios, donde las puntuaciones más altas corresponden a mejores propiedades. Los criterios principales y secundarios con pesos, niveles y puntuación correspondientes se enumeran en la Tabla 4 y en la Tabla 5, respectivamente.

Para cada criterio, se ha incluido el nivel "No clasificado", para tener en cuenta los casos en que la información no está disponible. Sin embargo, como se puede ver en las tablas, se han asignado diferentes puntuaciones a este nivel dependiendo del criterio considerado. Por ejemplo, hemos asignado de 33 sobre 90 al hecho de no saber el precio de una sustancia, pero el valor baja a 11 cuando se trata de niveles de toxicidad, ya que el desconocimiento de la toxicidad de un producto puede tener muy graves consecuencias para la salud humana y el



medio ambiente y no puede considerarse lo mismo que no saber si un producto es caro o no.

Tabla 4: Sistema de evaluación relativo a los criterios principales considerado. A un color más oscuro corresponde una mejor calidad y, de consecuencia, una puntuación más alta.

Criterio principal	Peso	Niveles	Puntuación (0-90)
Toxicidad por inhalación	0,5	Muy alto	0
		No clasificado	11
		Alto	22,5
		Tóxico	45
		Bajo	67,5

		No tóxico	90
Toxicidad en agua dulce (Daphnia)	0,2	Muy alto	0
		No clasificado	11
		Alto	22,5
		Tóxico	45
		Bajo	67,5
		No tóxico	90
Producción a nivel europeo (toneladas/año)	0,1	0-100	0
		100-500	22,5
		No clasificado	33
		500-1000	45
		1000-5000	67,5
		5000-10000	90
Precio (€/kg)	0,1	>500000	0
		50000-500000	22,5
		No clasificado	33
		5000-50000	45
		500-5000	67,5
		0-500	90
Toxicidad en agua dulce (peces)	0,06	Muy alto	0
		No clasificado	11
		Alto	22,5
		Tóxico	45
		Bajo	67,5
		No tóxico	90
Toxicidad oral	0,04	Muy alto	0
		No clasificado	11
		Alto	22,5
		Tóxico	45
		Bajo	67,5
		No tóxico	90

Tabla 5: Sistema de evaluación relativo a los criterios secundarios considerados. A un color más oscuro corresponde una mejor calidad y, de consecuencia, una puntuación más alta.

Criterio secundario	Peso	Niveles	Puntuación (0-10)
Toxicidad dérmica	1/6	Muy alto	0
		No clasificado	1,5
		Alto	2,5
		Tóxico	5
		Bajo	7,5
		No tóxico	10
Genotoxicidad	1/6	Muy alto	0
		No clasificado	1,5
		Alto	2,5
		Tóxico	5
		Bajo	7,5
		No tóxico	10
Citotoxicidad	1/6	Muy alto	0
		No clasificado	1,5
		Alto	2,5
		Tóxico	5
		Bajo	7,5
		No tóxico	10
Tóxico para la reproducción	1/6	Muy alto	0
		No clasificado	1,5
		Alto	2,5
		Tóxico	5
		Bajo	7,5
		No tóxico	10
Toxicidad en agua dulce (algas)	1/6	Muy alto	0
		No clasificado	1,5
		Alto	2,5
		Tóxico	5
		Bajo	7,5

		No tóxico	10
Toxicidad en el suelo (lombrices)	1/6	Muy alto	0
		No clasificado	1,5
		Alto	2,5
		Tóxico	5
		Bajo	7,5
		No tóxico	10

En este punto, la evaluación de la puntuación de los nanomateriales incluidos en la herramienta MCDA es muy sencillo. Se aplicó el método de la suma aritmética ponderada que consiste en la siguiente ecuación:

$$S_k = \sum_i w_i p_i + \sum_j w_j p_j ,$$

donde el índice i se refiere a los seis diferentes criterios principales, el índice j se refiere a los seis diferentes criterios secundarios y donde:

- S es la puntuación total del nanomaterial,
- w_i y p_i son, respectivamente, el peso y la puntuación del criterio principal i ,
- w_j y p_j son, respectivamente, el peso y la puntuación del criterio secundario j .

El primer término en S proporciona un valor entre 0 y 90, mientras que el Segundo entre 0 y 10, de modo que la puntuación total S devuelve un número entre 0 y 100.

3. LA HERRAMIENTA MICROSOFT EXCEL

El sistema de toma de decisiones basado en el análisis multicriterio se ha integrado en una herramienta Excel programada en el lenguaje Visual Basic. La aplicación está estructurada para que sea intuitiva y fácil de utilizar, y se realiza a través de cuatro sencillos pasos, dos de ellos opcionales, consistentes en cuatro preguntas a las que el usuario está invitado a responder para que tengamos la información necesaria para realizar el análisis.

Las dos informaciones necesarias son:

1. el sector industrial en el que el usuario está interesado (por ejemplo, embalaje de alimentos, construcciones, electrónica, automoción, deporte y bienestar...),
2. la propiedad que desea mejorar o conferir al polímero por medio de la nanotecnología (por ejemplo, mejorar las propiedades mecánicas, las antibacterianas, la resistencia o rigidez, las propiedades de autolimpieza...).

Si el usuario tiene información disponible sobre la matriz polimérica en la que quiere incrustar el nanomaterial, o ya sabe cuál es el producto va a fabricar (por ejemplo, películas si está en el sector de envasado de alimentos, o tuberías si trabaja con construcciones), puede introducirlo en la aplicación. Toda la información puede ser facilitada fácilmente por el usuario seleccionando una opción de las listas desplegables. Las listas son interdependientes, lo que significa que la propiedad

seleccionable por el usuario dependerá del sector industrial escogido, y así también las propiedades y los productos.

Después de responder a las cuatro preguntas, la herramienta busca en nuestra base de datos el nanofiller más apropiado. Los datos sobre los diferentes nanomateriales utilizados en los varios sectores industriales del mercado del plástico, las propiedades que son capaces de proporcionar y mejorar, y las matrices poliméricas en las que suelen estar incorporados, son el fruto de una minuciosa y profunda análisis de fuentes bibliográficas, ante todos libros sobre el uso industrial de nanopolímeros y artículos científicos evaluados por expertos y publicados en revistas especializadas. En la Figura 2 se muestra la estructura de la herramienta.

Interreg Sudoe **Decision making tool to assist the industry in the selection of the appropriate nanofiller**

The project

NanoDesk is a 36 months project (Sept-01-16 to Aug-31-2017) approved in the first call for the comunitary program Interreg SUDOE and financed by the European Fund for the Regional Development (FEDER). The main objective of the project is to promote innovation and the use of nanotechnology in the plastic industry sector, favouring the establishment of stable relationships among the companies of the sector and the scientific community, providing the business network and the scientific community a wide spectrum of services oriented to the introduction of R+D solutions in the framework of nanotechnology and nanostructured materials in the plastic sector.

The tool

The NanoDesk Tool has been built to guide you in the selection of the best nanofiller for your polymeric matrix. Choose your industrial sector, tell us what you produce and which property you want to enhance in your polymer by means of nanotechnology. Thanks to a decision making process based on different factors like price, availability and hazardousness, with just one click the NanoDesk Tool will suggest you the best options in the market.

Step 1	Please, select the industrial sector you are interested in:	Choose an option: Food
Step 2	Please, select the property you want to enhance:	Mechanical properties
Step 3	Please, select the polymeric matrix (optional):	Unknown
Step 4	Please, select the product (optional):	Unknown

What is the more appropriate nanofiller?

Filter
Beer
Benhur
Biorener
Packaging
Unknown

Figura 2: La herramienta para la toma de decisiones de NanoDESK.

Una vez que se hace clic en el botón, la aplicación se ejecuta y devuelve una lista de hasta tres nanomateriales, que representan las mejores opciones en el mercado para el sector industrial, la propiedad, el producto y la matriz polimérica elegidos. Un ejemplo se muestra en la Figura 3.

Es importante destacar que tanto la base de datos de los nanomateriales clasificados a través del sistema de puntuación de toma de decisiones como la base de datos detrás de la herramienta que contiene la información sobre productos, aplicaciones y matrices poliméricas, es algo que evolucionará y se ampliará durante todo el curso del proyecto, gracias a la experiencia y

conocimiento que esperamos adquirir durante su desarrollo y al contacto directo con expertos de la industria del plástico.

Results		
These are the possible alternatives:		
1	Calcium carbonate	
2	Nanoclays	
3	MWNNanotubes	

Figura 3: Ejemplo de lista de resultados proporcionada por la herramienta.

4. LA VERSIÓN WEB DE LA HERRAMIENTA

La herramienta de soporte de decisiones de NanoDESK descrita en la sección anterior es la primera del conjunto de aplicaciones que formaran parte de la plataforma web NanoDESK. Esta plataforma, pretende actuar como una estructura de transferencia de conocimiento y fomentar la difusión en el mercado plástico y la aplicación de nanocompósitos, proporcionando a los interesados un instrumento capaz de garantizar la calidad de los polímeros nanoestructurados producidos, garantizar la protección de la salud humana y el medio ambiente y fomentar la demanda de productos con propiedades añadidas.

Todas las funcionalidades descritas en la Sección 4 han sido implementadas en esta aplicación online, disponible en este enlace: <http://dsstool.sudoenanodesk.europeanprojects.net/#>. Es posible acceder directamente a la página web de la aplicación desde el sitio web del proyecto NanoDESK: <http://sudoenanodesk.europeanprojects.net>.

Las especificaciones técnicas de la herramienta son las siguiente:

- Para la parte del servidor (o backend) se ha utilizado un software open source para el desarrollo de entornos web dinámicos en el lenguaje **PHP**¹, llamado **CodeIgniter**²;
- La parte del cliente (o frontend) ha sido programada utilizando **JavaScript(AngularJS)**³, **CSS**⁴ and **HTML5**⁵;

¹ PHP: lenguaje de programación de uso general de código del lado del servidor originalmente diseñado para el desarrollo web de contenido dinámico

²<https://www.codeigniter.com/>

³ JavaScript(AngularJS): entorno de JavaScript de código abierto, mantenido por Google, que se utiliza para crear y mantener aplicaciones web de una sola página.

⁴ CSS (Cascading Style Sheets): lenguaje de diseño gráfico para definir y crear la presentación de un documento estructurado escrito en un lenguaje de marcado.2 Muy usado para establecer el diseño visual de las páginas web e interfaces de usuario escritas en HTML o XHTML.

⁵ HTML5: es la quinta revisión importante del lenguaje básico de la World Wide Web, HTML.

- Para el **database**, se ha utilizado **MySQL**⁶.

La Figura 4 muestra un ejemplo de análisis realizado con la herramienta NanoDESK. El diseño es muy limpio y intuitivo, la aplicación muy fácil de utilizar y el usuario está llamado a responder a las mismas preguntas detalladas en la Sección 4. El resultado del análisis es una lista de hasta tres nanomateriales considerados por nuestro sistema los mejores para el producto y la propiedad seleccionados. También se muestra, a la derecha, la clasificación de las sustancias propuestas para dar al usuario una idea de su nivel de adecuación.

The screenshot shows the NanoDESK Decision Support System Tool interface. The main content area is titled "Decision Support System Tool" and contains a form with four steps: Step 1 (Packaging), Step 2 (Barrier properties), Step 3 (Polypropylene), and Step 4 (Packaging). Below the form are "Simulate" and "Clean" buttons. The "Result" section displays "CaCO3" with a 3D ball-and-stick model of the molecule and a descriptive text. Below the model is a table titled "ENMs list" with one entry: CaCO3 with a score of 4 stars.

#	ENM	Score
1	CaCO3	★★★★☆

Figura 4: Ejemplo de análisis realizado mediante la aplicación web para la toma de decisiones de NanoDesk.

⁶ MySQL: an open-source relational database management system.

5. CONCLUSIONES

Durante la acción A1.3 ha sido desarrollado un sistema de toma de decisiones, con el objetivo de asistir a las empresas del sector plástico en la selección del nanomaterial más apropiado para ser incorporado en un polímero, en función de sus necesidades específicas.

Se han definido los parámetros más influyentes para la selección, teniendo en cuenta la protección de la salud humana y el medio ambiente, así como el papel de las diferentes sustancias en el mercado del plástico. Sucesivamente se les ha asignado una jerarquía. El sistema, basado en un análisis multicriterio, se ha incluido en una aplicación Microsoft EXCEL programada utilizando Visual Basic. Esta herramienta, que es fácil de usar, ha sido también integrada en la plataforma web de NanoDESK para ayudar a las partes interesadas del sector plástico a ponerse en contacto con los beneficios de la nanotecnología de una manera segura, sencilla y conveniente.