

Título do projeto:

**Ferramentas web avançadas para a promoção da aplicação de nanotecnologias e utilização segura de nanomateriais no sector dos plásticos.**

Acrónimo do projeto: **NanoDesk**

Código do projeto: **SOE1/P1/E0215**

Título do relatório:

**E. A1c Sistema de tomada de decisões baseada na Análise Multicritério de Decisão (AMCD)**

Coordenador e Responsável do Documento  
**ITENE**

Data da preparação:

**03/2017**

**05/2017**

Natureza do entregável:

**RESTRICTO**

<b>Ação</b>	<b>A1.3</b>	<b>Período de tempo</b>	<b>Março 2017</b>
<b>Tarefas relacionadas</b>	<b>principais</b>	<b>A.1.3</b>	

---

## SUMÁRIO EXECUTIVO

O objetivo da atividade A1.3 é desenvolver uma ferramenta capaz de suportar a identificação e seleção do Nanomaterial Engenhado (NMEs) mais apropriado para a aplicação no sector dos plásticos para melhorar uma propriedade específica do composto. A ferramenta, que está disponível em formato Microsoft Excel e numa aplicação web multilingue, consiste num sistema de tomada de decisões baseado na Análise Multicritério de Decisão. As variáveis mais significativas que determinam se um nanomaterial é adequado para um uso ou aplicação específicos foram identificadas (critérios de seleção) e quantificadas, estabelecendo uma hierarquia e atribuindo-lhes uma pontuação. Este sistema de critérios foi então implementado numa aplicação no Microsoft EXCEL utilizando a linguagem de programação do Visual Basic (VB) e como uma aplicação web disponível para os *stakeholders* na plataforma online do NanoDesk.

---

## LISTA DE ACRÓNIMOS

**NMEs:** Nanomateriais Engenhados  
**AMCD:** Análise Multicritério de Decisão  
**VB:** Visual Basic

---

## TABELA DE CONTEÚDOS

SUMÁRIO EXECUTIVO .....	2
LISTA DE ACRÓNIMOS .....	3
TABELA DE CONTEÚDOS.....	4
LISTA DE TABELAS .....	5
LISTA DE FIGURAS .....	5
1. OBJETIVO DA FERRAMENTA .....	6
2. ANÁLISE MULTICRITÉRIOS DE DECISÃO .....	7
2.1. Definição de Análise Multicritérios de Decisão (AMCD) .....	7
2.2. Alternativas .....	7
2.3. Determinação dos critérios de seleção e hierarquia .....	8
2.4. Sistema de pontuação e pesos relativos .....	9
3. A FERRAMENTA EM MICROSOFT EXCEL .....	12
4. A APLICAÇÃO WEB .....	14
5. CONCLUSÕES .....	16

---

## LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 1: Lista das alternativas consideradas no processo de tomada de decisão.</i>	7
<i>Tabela 2: Principais critérios de seleção considerados na Análise Multicritérios de Decisão.</i>	8
<i>Tabela 3: Fatores secundários incluídos no sistema de tomada de decisão</i>	8
<i>Tabela 4: Sistema de pontuação relativo aos principais critérios considerados. A uma cor mais escura corresponde uma qualidade melhor e conseqüentemente uma pontuação mais elevada.</i>	10
<i>Tabela 5: Sistema de pontuação relativo aos critérios secundários considerados. A uma cor mais escura corresponde uma qualidade melhor e conseqüentemente uma pontuação mais elevada</i>	11

## LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 1: Representação esquemática do sistema de pontuação aplicado.</i>	9
<i>Figura 2: A ferramenta AMCD NanoDESK.</i>	13
<i>Figura 3: Exemplo da lista de resultados fornecida pela ferramenta NanoDESK.</i>	14

---

## 1. OBJETIVO DA FERRAMENTA

O projeto SUDOE NanoDesk está focado na promoção das nanotecnologias como instrumento fundamental para o desenvolvimento de novos materiais plásticos. Estudos têm mostrado como a presença de nanomateriais fornece aos compostos novas propriedades de elevado valor ou aprimora as propriedades já existentes relativamente ao material na forma “primária”(bulk). No entanto, na seleção do nanomaterial mais adequado a ser empregue num produto específico, não só os benefícios em termos de propriedades adquiridas ou aprimoradas precisam ser considerados, mas também os potenciais riscos que ele representa tanto para a saúde humana como para o meio ambiente.

O principal objetivo do projeto é o desenvolvimento de uma plataforma web destinada a incentivar a difusão no mercado e a aplicação de nanocompósitos, mas também atuar como estrutura de transferência de conhecimento. A ideia é fornecer ao mercado dos plásticos um instrumento capaz de assegurar a qualidade dos polímeros de nanoestrutura produzidos, garantir a proteção da saúde humana e do meio ambiente e fomentar a demanda de produtos com propriedades aprimoradas no sector dos plásticos, aumentando a pesquisa e a competitividade.

**A Ação A1.3 enquadra-se neste âmbito e visa a construção de um sistema de tomada de decisão para auxiliar as empresas do sector dos plásticos na seleção do nanomaterial mais adequado a usar, de acordo com as suas necessidades.** Com base na análise multicritérios de decisão (AMCD), foi criada uma aplicação em Microsoft EXCEL utilizando a linguagem Visual Basic (VB). A seleção do nanomaterial adequado é influenciada por diferentes fatores ou variáveis. O alvo da nossa ferramenta é o empresário que procura entrar em contato com a nanotecnologia aplicada a produtos plásticos ou que tem curiosidade por saber mais sobre as opções disponíveis no mercado. No sentido de disponibilizar a ferramenta a todos os *stakeholders* e usuários interessados, o sistema de suporte à decisão também foi integrado na plataforma web NanoDESK.

O utilizador irá selecionar o sector da indústria a que pertence e a propriedade que deseja melhorar ou conferir ao produto através do uso de nanomateriais. No entanto, diferentes fatores podem influenciar a seleção, como preço, disponibilidade no mercado e perigosidade da substância, todos os aspetos são diretamente tidos em conta pela ferramenta. Esses fatores constituem o ponto de partida para definir um conjunto de critérios de seleção específicos e a aplicação quantifica-os, estabelecendo uma hierarquia e atribuindo uma pontuação a cada substância considerada e, eventualmente, sugere ao utilizador as melhores opções para o setor industrial e produto selecionados.

Mais detalhes sobre as substâncias incluídas, os critérios de seleção e o sistema de pontuação serão fornecidos nas secções seguintes.

---

## 2. ANÁLISE MULTICRITÉRIOS DE DECISÃO

### 2.1. Definição de Análise Multicritérios de Decisão (AMCD)

Análise Multicritérios de Decisão, ou AMCD, é uma ferramenta valiosa que pode ser aplicada a muitas decisões complexas. É mais apropriada na resolução de problemas caracterizados como uma escolha entre alternativas. O propósito comum destes métodos é avaliar e escolher entre alternativas, baseados em múltiplos critérios utilizando a análise sistemática de modo a superar as limitações de decisão destruturadas tomadas individualmente ou em grupo.

AMCD utilizam para a progressão as seguintes etapas:

1. Definição do problema, com base nos *inputs* fornecidos pelos *stakeholders*;
2. Gerar alternativas, através da ajuda dos *stakeholders*, incluindo especialistas;
3. Formulação de critérios e subcritérios, através dos quais as alternativas devem ser julgadas, e desenvolvimento de hierarquias com base no julgamento dos *stakeholders*;
4. Recolha de informações sobre a importância relativa dos critérios, que permite estabelecer os pesos dos diferentes critérios no processo de tomada de decisão;
5. Escolha sistemática das alternativas apropriadas pela especificação de algoritmos bem definidos utilizando as pontuações e pesos dos critérios.

### 2.2. Alternativas

Na Tabela 1 estão listados os possíveis nanomateriais que podem ser utilizados como enchimento. Mais detalhes sobre as razões da seleção podem ser encontrados no entregável A1a.

**Tabela 1: Lista das alternativas consideradas no processo de tomada de decisão.**

Nome	Fórmula
Dióxido de Titânio	TiO <sub>2</sub>
Óxido de Zinco	ZnO
Dióxido de Silício	SiO <sub>2</sub>
Óxido de Cobre	CuO
Óxido de Alumínio	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Prata	Ag
Nanoargilas	-
Carbono negro	C
Grafeno	C
Fulerenos	C
Nanotubos de parede simples	C
Nanotubos de paredes múltiplas	C
Ouro	Au

Carbonato de Cálcio	CaCO <sub>3</sub>
---------------------	-------------------

### 2.3. Determinação dos critérios de seleção e hierarquia

A escolha do nanomaterial apropriado para utilizar num sector industrial específico ou num produto específico pode ser afetada por um elevado número de variáveis, tendo em conta não só o papel da substância no mercado como também a sua perigosidade. Os principais critérios de seleção que escolhemos pertencem a ambas as classes e estão listados na Tabela 2.

**Tabela 2: Principais critérios de seleção considerados na Análise Multicritérios de Decisão.**

Principais critérios:
Toxicidade por inalação
Toxicidade em água doce (Daphnia)
Produção europeia por ano (tons/ano)
Preço (€/kg)
Toxicidade em água doce (Peixes)
Toxicidade oral

Uma vez que queremos que as empresas do setor dos plásticos façam uma utilização segura dos nanomateriais, a este grupo pertencem a via de exposição às substâncias mais provável para o Homem, a inalação, e a perigosidade do material para as espécies aquáticas mais sensíveis à contaminação da água (Daphnia e peixe). No entanto, queremos também que a nossa abordagem seja realista para a indústria e considere as necessidades dos diferentes públicos de interesse. Portanto, incluímos também nos principais critérios o preço do material e sua disponibilidade no mercado, uma vez que o nosso objetivo é fornecer à indústria dos plásticos soluções que sejam acessíveis e fáceis de adotar.

Na Tabela 3, encontra-se uma lista de fatores secundários, que foram tidos em conta na AMCD e que influenciam a seleção do nanomaterial. Entre eles as outras, menos prováveis, vias de exposição dos humanos a NMEs.

**Tabela 3: Fatores secundários incluídos no sistema de tomada de decisão.**

Fatores secundários:
Toxicidade dérmica
Genotoxicidade
Citotoxicidade
Toxicidade reprodutiva
Toxicidade em água doce (Algas)
Toxicidade nos solos (minhocas)



Em cada critério ou fator, é possível escolher, para cada substância, entre cinco diferentes níveis qualitativos (muito elevado, elevado, médio, baixo, muito baixo) para além do “ não avaliado”, opção para o caso da informação não estar disponível na literatura (ver Tabela 4 e Tabela 5).

## 2.4. Sistema de pontuação e pesos relativos

Os critérios acima referidos são utilizados na atribuição da pontuação ao nanomaterial que incluímos na nossa ferramenta AMCD.

O sistema de pontuação que aplicamos está esquematicamente representado na Figura 1. Os critérios principais determinam 90% da pontuação, enquanto os restantes 10% são atribuídos pelos critérios secundários. Cada critério tem o seu próprio peso, independentemente se é principal ou secundário. No caso dos critérios principais, os pesos foram atribuídos com base na seguinte lista de prioridades:

- Saúde humana;
- Segurança ambiental;
- Acessibilidade do produto,

e tendo em conta que a soma dos pesos deve rondar o um. Aos critérios secundários foi atribuída a mesma importância, que é simplesmente 1/6.

Dentro de um critério único, definimos diferentes níveis e estabelecemos as pontuações correspondentes a cada um deles. Essas pontuações vão de 0 a 90 no caso dos critérios principais e

de 0 a 10 no caso dos secundários, onde pontuações mais elevadas correspondem a propriedades melhores. Critérios principais e secundários com os correspondentes pesos, níveis e pontuações estão apresentados nas Tabela 4 e Tabela 5, respetivamente.

Para todos os critérios, incluímos o nível “não avaliado”, para salvaguardar os casos em que a informação não estar disponível. No entanto, como se pode ver nas tabelas, diferentes pontuações foram atribuídas a estes níveis dependendo do critério considerado. Por exemplo, foram atribuídos 33 pontos de 90 ao facto de não se saber o preço de uma substância, mas o valor desce para 11 se estivermos a considerar os níveis de toxicidade, uma vez que não saber a toxicidade de um produto pode ter consequências muito sérias para a saúde humana e ambientalmente, sendo que por isso não

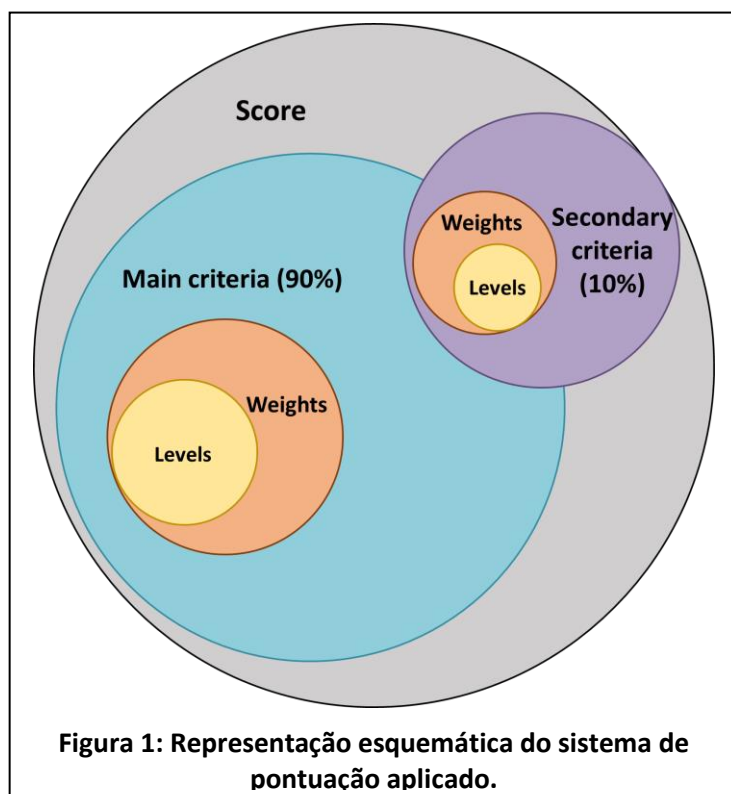


Figura 1: Representação esquemática do sistema de pontuação aplicado.

pode ser considerado o mesmo que não saber se um produto é dispendioso ou não.

**Tabela 4: Sistema de pontuação relativo aos principais critérios considerados. A uma cor mais escura corresponde uma qualidade melhor e consequentemente uma pontuação mais elevada.**

<b>Crítérios principais</b>	<b>Peso</b>	<b>Níveis</b>	<b>Pontuação (0-90)</b>
<b>Toxicidade por inalação</b>	<b>0,5</b>	Muito elevado	0
		Não avaliado	11
		Elevado	22,5
		Tóxico	45
		Baixo	67,5
		Não tóxico	90
<b>Toxicidade em água doce (Daphnia)</b>	<b>0,2</b>	Muito elevado	0
		Não avaliado	11
		Elevado	22,5
		Tóxico	45
		Baixo	67,5
		Não tóxico	90
<b>Produção europeia (tons/anos)</b>	<b>0,1</b>	0-100	0
		100-500	22,5
		Não avaliado	33
		500-1000	45
		1000-5000	67,5
		5000-10000	90
<b>Preço (€/kg)</b>	<b>0,1</b>	>500000	0
		50000-500000	22,5
		Não avaliado	33
		5000-50000	45
		500-5000	67,5
		0-500	90
<b>Toxicidade em água doce (peixes)</b>	<b>0,06</b>	Muito elevado	0
		Não avaliado	11
		Elevado	22,5
		Tóxico	45
		Baixo	67,5

		Não tóxico	90
Toxicidade oral	0,04	Muito elevado	0
		Não avaliado	11
		Elevado	22,5
		Tóxico	45
		Baixo	67,5
		Não tóxico	90

**Tabela 5: Sistema de pontuação relativo aos critérios secundários considerados. A uma cor mais escura corresponde uma qualidade melhor e consequentemente uma pontuação mais elevada.**

Critérios secundários	Peso	Níveis	Pontuação (0-10)
Toxicidade dérmica	1/6	Muito elevado	0
		Não avaliado	1,5
		Elevado	2,5
		Tóxico	5
		Baixo	7,5
		Não tóxico	10
Genotoxicidade	1/6	Muito elevado	0
		Não avaliado	1,5
		Elevado	2,5
		Tóxico	5
		Baixo	7,5
		Não tóxico	10
Citotoxicidade	1/6	Muito elevado	0
		Não avaliado	1,5
		Elevado	2,5
		Tóxico	5
		Baixo	7,5
		Não tóxico	10
Toxicidade reprodutiva	1/6	Muito elevado	0
		Não avaliado	1,5

		Elevado	2,5
		Tóxico	5
		Baixo	7,5
		Não tóxico	10
Toxicidade em água doce (algas)	1/6	Muito elevado	0
		Não avaliado	1,5
		Elevado	2,5
		Tóxico	5
		Baixo	7,5
		Não tóxico	10
Toxicidade nos solos (minhocas)	1/6	Muito elevado	0
		Não avaliado	1,5
		Elevado	2,5
		Tóxico	5
		Baixo	7,5
		Não tóxico	10

Neste momento, a avaliação da pontuação de um nanomaterial incluído na ferramenta AMCD é direto. Nós aplicamos o método da soma aritmética ponderada que consiste na seguinte equação:

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

onde o index  $i$  percorre os seis diferentes critérios principais, o index  $j$  percorre os seis diferentes critérios secundários e onde:

- $S$  é o total de pontos do nanomaterial,
- $w_i$  e  $p_i$  são respetivamente o peso e a pontuação  $i^{\text{º}}$  do critério principal ,
- $w_j$  e  $p_j$  são respetivamente o peso e a pontuação  $j^{\text{º}}$  do critério secundário.

O primeiro termo em  $S$  dá um valor entre 0 e 90, enquanto o segundo entre 0 e 10, de modo que o resultado  $S$  é um número entre 0 e 100 que corresponde à pontuação total do nanomaterial.

### 3. A FERRAMENTA EM MICROSOFT EXCEL

A AMCD foi integrada numa ferramenta de Excel programada na linguagem do Visual Basic. A aplicação está estruturada para ser de fácil utilização e procede-se em apenas quatro etapas simples, duas delas opcionais, consistindo em quatro perguntas em que o utilizador é convidado a responder para que nos sejam fornecidas as informações necessárias para a realização da análise. As duas perguntas obrigatórias são:

1. O sector industrial no qual está interessado (ex. embalagens para produtos alimentares, construção, eletrónica, automóvel, desporto e bem estar...),
2. A propriedade que pretende melhorar ou conferir ao polímero através da nanotecnologia (ex. melhorar propriedades mecânicas, propriedades antibacterianas, melhorar a resistência ou dureza, propriedades de autolimpeza...).

Se o utilizador tiver disponíveis informações sobre a matriz polimérica onde ele pretende incorporar o nanomaterial, ou se já sabe qual o produto que vai produzir (ex. filmes se estiver no sector de embalagens produtos alimentares, ou tubos se trabalha com construções), pode apresentá-lo na aplicação. Todas as respostas podem ser facilmente fornecidas pelo utilizador selecionando uma opção de várias listas de seleção. Estas são interdependentes, o que significa que a propriedade passível de selecionar pelo utilizador dependerá do sector industrial escolhido, assim como das propriedades e dos produtos.

Depois de respondidas as quatro perguntas, a ferramenta procura na nossa base de dados o nanoenchimento mais apropriado. Os dados sobre os nanomateriais utilizados nos diferentes sectores de mercado da indústria dos plásticos, as propriedades que estes são capazes de aprimorar ou conferir e a matriz polimérica em estes podem ser incorporados, foram recolhidos de uma profunda e completa análise de fontes bibliográficas, especialmente de livros sobre o uso de nanopolímeros e artigos revistos por pares publicados em revistas especializadas. Na **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** é apresentada a estrutura da ferramenta.

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: <b>Food</b>
Step 2	Please, select the property you want to enhance:	<b>Mechanical properties</b>
Step 3	Please, select the polymeric matrix (optional):	<b>Uknown</b>
Step 4	Please, select the product (optional):	<b>Unknown</b> <input type="text" value="Filme"/> <input type="text" value="Beer"/> <input type="text" value="Bottle"/> <input type="text" value="Stapler"/> <input type="text" value="Packaging"/> <input type="text" value="Unknown"/>

**What is the more appropriate nanofiller?**

**Click**

Figura 2: A ferramenta AMCD NanoDESK.

Uma vez clicado na opção, a aplicação é executada e apresenta uma lista de até três nanomateriais, que representam a melhor opção no mercado para o sector industrial, propriedade, produto e matriz polimérica escolhidos. Um exemplo é apresentado na Figura 3.

É importante salientar que os bancos de dados, dos nanomateriais classificados através da pontuação do sistema de tomada de decisão e de atrás da ferramenta, que contêm a informação sobre produtos, aplicações e matrizes poliméricas, sejam algo que esperamos evoluir e alargar dentro do projeto e também no período após a sua conclusão deste. Sendo isto possível graças à experiência e ao conhecimento que esperamos adquirir durante o desenvolvimento do projeto e ao contato direto com especialistas da indústria dos plásticos.

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

Figura 3: Exemplo da lista de resultados fornecida pela ferramenta NanoDESK.

#### 4. A APLICAÇÃO WEB

A ferramenta de suporte à decisão NanoDESK descrita na secção anterior, é o primeiro de um conjunto de aplicações que serão incluídas na plataforma web NanoDESK, que tem como objetivo atuar como uma estrutura de transferência de conhecimento, incentivando a difusão e a aplicação de nanocompositos no mercado dos plásticos, proporcionando aos *stakeholders* um instrumento capaz de garantir a qualidade dos polímeros de nanoestruturados produzidos, garantir a proteção da saúde humana e do meio ambiente e fomentar a demanda de produtos com propriedades aprimoradas no setor.

Todas as funcionalidades descritas na Secção 4 foram implementadas nesta aplicação online disponível em <http://dsstool.sudoenanodesk.europeanprojects.net/#> e diretamente acessíveis a partir do website do projeto <http://sudoenanodesk.europeanprojects.net>.

As especificações técnicas da ferramenta encontram-se a seguir listadas:

- Para o **backend (ou parte do servidor)** foi utilizado um software de código aberto para desenvolver uma estrutura web dinâmica na linguagem PHP<sup>1</sup> designada de **CodeIgniter**<sup>2</sup>;

<sup>1</sup> PHP: linguagem de escrita utilizada para a criação de scripts desenhada inicialmente para desenvolvimento web, mas também é usada como uma linguagem de programação corrente.

<sup>2</sup> <https://www.codeigniter.com/>

- O **frontend (ou parte do cliente)** foi programada utilizando **JavaScript(AngularJS)<sup>3</sup>**, **CSS<sup>4</sup>** e **HTML5<sup>5</sup>**;
- Para a **base de dados**, foi utilizado o **MySQL<sup>6</sup>**.

Na Figura 4 mostramos o exemplo de uma análise feita utilizando a ferramenta NanoDESK. O *design* é muito simples e de fácil utilização. Ao utilizador é pedido que responda as perguntas detalhadas da Secção 4 e os resultados são uma lista de até três nanomateriais considerados pelo nosso sistema os melhores para o produto e propriedade selecionados. O ranking das propostas também é apresentado para dar ao utilizador a ideia do nível de adequação.

The screenshot displays the NanoDESK Decision Support System Tool interface. The top part is a form titled "Decision Support System Tool" with the following steps:

- Step 1: Packaging
- Step 2: Barrier properties
- Step 3: Polypropylene
- Step 4: Packaging

Below the form are "Simulate" and "Clean" buttons. The bottom section shows the result for CaCO<sub>3</sub>, including a 3D ball-and-stick model of the molecule and a table of ENMs list.

#	ENM	Score
1	CaCO <sub>3</sub>	★★★★☆

**Figura 4: Exemplo de uma análise feita utilizando a ferramenta de tomada de decisões NanoDESK.**

<sup>3</sup> JavaScript(AngularJS): Aplicação web de estrutura de programação *front-end*, de acesso livre, baseada em JavaScript.

<sup>4</sup> CSS (Cascading Style Sheets): linguagem utilizada para adicionar/modificar estilos em páginas web.

<sup>5</sup> HTML5: quinta e atual versão da linguagem de marcação de hipertexto utilizada na construção de páginas web (*World Wide Web*).

<sup>6</sup> MySQL: sistema de gerenciamento de base de dados

---

## 5. CONCLUSÕES

Durante a Ação A1.3, construímos um sistema de tomada de decisões com o objetivo de auxiliar as empresas do sector dos plásticos na seleção do nanomaterial mais apropriado para incorporar num polímero de acordo com suas necessidades específicas. Os parâmetros mais influentes para a seleção foram definidos, tendo em consideração a proteção da saúde humana e do meio ambiente e também o papel das diferentes substâncias no mercado dos plásticos. Sucessivamente foi-lhes atribuída uma hierarquia. O sistema, baseado na AMCD, foi incluído numa aplicação em Microsoft EXCEL programada utilizando o Visual Basic. Esta ferramenta, que é de uso direto, também foi integrada na plataforma web NanoDESK para ajudar os *stakeholders* do sector dos plásticos a entrar em contacto com os benefícios da nanotecnologia de forma segura, simples e conveniente.