

# Un modelo Ontológico para ayudar al reconocimiento de minerales

## An Ontological Model to Help Minerals Recognize

**Jimmy Rosales<sup>1\*</sup>, Carlos Rojas<sup>1</sup>, Fabricio Mansilla<sup>2</sup>, Joseps Andrade<sup>1</sup>, José Castillo<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Facultad de Ingeniería Geológica Minera y Metalúrgica, Universidad Nacional de Ingeniería, Av Túpac Amaru. 210, Lima-Perú

<sup>2</sup> Facultad de Ingeniería Eléctrica y Electrónica, Universidad Nacional de Ingeniería, Av Túpac Amaru. 210, Lima-Perú

<sup>3</sup> Departamento de Ciencias de la Computación, Universidad d Alcalá, Pza. San Diego, s/n. 210, Madrid-España

Recibido : 27/06/2016 Aceptado: 04/10/2016

### RESUMEN

El presente trabajo, está enfocado en el desarrollo de un modelo Ontológico para ayudar al reconocimiento de minerales sulfurados. Dicha Ontología se implementará siguiendo los métodos de construcción recomendados. Las diversas propiedades de los minerales al estar almacenada en Ontologías se pueden extraer mediante el uso del lenguaje de consultas semántico. Finalmente, dicho modelo Ontológico diseñado se puede usar en el futuro para la implementación de un portal construido con las herramientas de la Web Semántica, para que las búsquedas de propiedades de los minerales sean más rápidas y precisas.

*Palabras clave:* Web Semántica, Ontologías, Reconocimiento de minerales

### ABSTRACT

The present work is focused on the development of an Ontological model to help the recognition of sulfuric minerals. This ontology will be implemented following the recommended construction methods. The diverse properties of the minerals to be stored in Ontologies can be extracted by means of the semantic query language. Finally, this ontological model can be used in the future for the implementation of a portal built with Semantic Web tools, so that mineral property searches are faster and more accurate.

*Keywords:* Semantic Web, Ontologies, Mineral Recognition

## 1 INTRODUCTION

Como se sabe el tamaño de la World Wide Web (WWW) ha crecido de forma espectacular en los últimos años, lo que ha provocado un incremento notable en la dificultad de encontrar recursos más interesantes acerca de un tema en concreto, debido en gran parte, por la ambigüedad de los términos empleados en las consultas que usan las herramientas de búsqueda.

La Web Semántica, denominada a veces también Web 3.0, bajo la dirección del inventor de la Web original, Tim Berners-Lee [2], pretende abordar la resolución de este problema, creando para ello un mecanismo universal de intercambio de información, al añadir a la Web ya existente una cierta semántica o

significado, permitiendo así establecer un mecanismo de procesamiento automático de su contenido semántico por un ordenador.

Para dotar a la Web de un significado comprensible por los ordenadores, es necesario disponer de una cierta forma de representar el conocimiento. Como solución para la representación distribuida del conocimiento, la Web Semántica propone la utilización de colecciones de información conocidas como Ontologías.

En filosofía, una Ontología es una teoría acerca de la naturaleza de la existencia y de los tipos de cosas que existen. Sin embargo, los investigadores en Inteligencia Artificial han incorporado este término a su uso particular con el significado de documento o fichero que define formalmente un conjunto de

La Revista Científica TECNIA protege los derechos de autor bajo la Licencia 4.0 de Creative Commons: Attribution 4.0 International (CC BY 4.0).

\*Correspondencia:

E-mail: jimmyaurelio@yahoo.es

conceptos que se organizan de forma jerárquica, y que establece las propiedades y relaciones que existen entre ellos, a lo que se añade un conjunto de reglas de inferencias que permiten manipular automáticamente la información [7]. Al estar almacenada la información en Ontologías, la Web Semántica presenta una serie de herramientas con lo cual la extracción de información de la Ontología es más rápida y para ello se utiliza el lenguaje de consultas semántico denominado SPARQL (Protocol and RDF Query Language) [23]. El aporte del presente artículo está centrado en la contribución de cómo construir una Ontología, que sirva en el futuro como modelo para la construcción de un Portal con las herramientas de la Web Semántica que ayude al reconocimiento de minerales, de manera rápida y efectiva.

El presente trabajo está dividido de la siguiente manera, en la sección 2 presentamos la revisión de la literatura, en la sección 3 los problemas actuales y finalmente en la sección 4 la metodología a usar para la construcción de la Ontología y finalmente en la sección 5 se presentan las conclusiones finales del trabajo.

## 2 REVISIÓN DE LA LITERATURA

Realizamos una breve revisión de la literatura relacionada al tema de Ontologías, Web Semántica y consultas SPARQL, la cual mencionamos brevemente a continuación.

En [13] presentan el uso de la metodología denominada Methontology que proporciona pautas para especificar Ontologías en el nivel de conocimiento, además presentan la herramienta ODE que permite la construcción de la Ontología que abarca todo el ciclo de vida y la implementación automática de ella. Finalmente, estas herramientas son aplicadas en la construcción de una Ontología aplicado en Química.

En [9] se presenta el sitio web “Óptica Mineral” con el objetivo de facilitar el aprendizaje de las propiedades ópticas de los minerales al microscopio y su empleo en la caracterización e identificación de minerales en lámina delgada.

Independientemente en [5], presentan una Ontología en Química basada en reconocimiento de grupos funcionales químicos y fue desarrollado para clasificar moléculas pequeñas. Esta Ontología sirve como una poderosa herramienta para buscar bases de datos químicas e identificar grupos funcionales clave responsables de actividades biológicas.

En [26], presentan un trabajo enfocado en el desarrollo de una aplicación Web turística orientada al sector hotelero del puerto de Acapulco en México. La información esta almacenada en una Ontología geográfica que describe servicios turísticos, tales

como hospedaje y entretenimiento. Para explotar esta información proponen un módulo de búsqueda basado en SPARQL

Luego en [20], presentan un trabajo donde dan a conocer la aplicación de una Ontología, que es una herramienta informática de gran actualidad y la aplican al estudio de minerales, como una aplicación en el ámbito ambiental a los silicatos. Independientemente en [19], desarrollan una herramienta de edición de estructuras de modelos llamada ChemEd, programada en JAVA, que permite dibujar estructuras químicas en una interfaz gráfica de usuario (GUI) seleccionando fragmentos estructurales apropiados definidos en una biblioteca de fragmentos. Los términos que representan los fragmentos estructurales se organizan en una Ontología de fragmentos para proporcionar un apoyo conceptual.

## 3 PROBLEMAS ACTUALES

La identificación de minerales es un proceso complejo, que requiere de la intervención de un experto, principalmente cuando se tiene poca información sobre el origen de la roca a analizar. Siguiendo una sistemática, basada en las propiedades más relevantes de cada mineral, se puede lograr identificarlo.

Un microscopista, compara propiedades ópticas en numerosas tablas y gráficas que les permiten reducir las opciones minerales, y finalmente logra la identificación mediante el método de la eliminación. El proceso puede tardar desde unos minutos hasta horas, dependiendo de la experiencia del experto y del mineral en cuestión.

La identificación de los minerales se realiza mediante el estudio de sus características y a través de sus propiedades ópticas. Estas propiedades estas relacionadas a la interacción de la luz visible con las sustancias y están determinadas, principalmente por la composición química y por su estructura cristalina [9]. La descripción de estas propiedades se encuentra en muchos casos en referencias bibliográficas de mineralogía óptica [4] [10].

En ocasiones más complejas, es necesario someter a la muestra a exámenes más específicos de identificación, como análisis químico y difracción de rayos x.

A partir de este problema determinado, se pretende generar un Modelo Ontológico que almacene las propiedades de varios minerales y mediante el uso de las herramientas de la Web Semántica, se pueda extraer de manera más rápida y eficiente dichas propiedades.

#### 4 METODOLOGÍA A USAR PARA LA CONSTRUCCIÓN DE LA ONTOLOGÍA

Existen multitud de propuestas metodológicas para el diseño y construcción de Ontologías, siendo algunas de las más relevantes las siguientes: La metodología Cyc [11], la metodología de construcción [21], la metodología de [8], la metodología KACTUS [1], la Methontology [6], la metodología SENSUS [22], la metodología On-To-Knowledge [21], y la metodología de la Universidad de Stanford [14].

Para la construcción de nuestra Ontología usaremos las recomendaciones de la Methontology [6] que es una metodología creada por el Grupo de Ingeniería Ontológica de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM), donde los pasos a seguir son los siguientes:

- **Especificación.** Se desarrolla un documento que contenga la meta de la Ontología, nivel de granularidad, alcance, propósito. Se identifican los términos a ser representados, sus características y relaciones;
- **Conceptualización.** Se organiza el conjunto de términos y sus características en una representación intermedia que el desarrollador de la ontología y los expertos puedan entender. En este paso se construye un glosario de términos, diagramas de relaciones binarias, diccionario de conceptos, tablas de atributos instancias, tablas de atributos clases, tabla de axiomas lógicos, tablas de constantes, tablas de instancias;
- **Adquisición de conocimiento.** Este paso se lleva a cabo de manera independiente en la metodología. Su ejecución puede coincidir con otros pasos. Por lo general la adquisición de conocimiento se realiza en tres etapas: reuniones preliminares con los expertos, análisis y revisión de la bibliografía asociada al dominio, y una vez que se tiene un conocimiento base se refina y detalla el conocimiento hasta completar la Ontología;
- **Integración.** Se identifican las ontologías candidatas a ser reutilizadas en la ontología que se está construyendo, incorporando aquellas piezas de conocimiento que sean de utilidad;
- **Implantación.** Consiste en la codificación del modelo conceptual en un modelo codificado en lenguaje Ontolingua;
- **Evaluación.** Se realiza un juicio técnico a la ontología, al ambiente de software asociado y a la documentación con respecto a un esquema de referencia en cada paso de la metodología. El esquema de referencia

puede ser: requisitos de especificación, preguntas de competencias y/o el mundo real;

- **Documentación.** Se detalla clara y exhaustivamente cada paso completado y los productos generados.

##### Componentes de la Ontología

El concepto de Ontología se basa en la descripción del mundo real, similar a la programación orientado a objetos (POO), por lo que nos permite representarlo por medio de clases, subclases, propiedades, permitiendo construir relaciones entre ellos, y usar reglas a través del cual puedan funcionar e interactuar. Una Ontología [3] nos proporciona un vocabulario de clases y relaciones para describir un dominio respectivo. Actualmente existen diferentes lenguajes para el diseño de Ontologías, el más reciente estándar dado por la W3C es el denominado como OWL [15].

Al existir pocos trabajos que se enfoquen en la parte de minerales, el principal aporte del trabajo es la realización de un modelo Ontológico que ayude al reconocimiento de minerales pertenecientes al grupo de sulfuros.

Luego de hacer el análisis del caso, se diseñara la Ontología, conteniendo los principales conceptos descriptivos del caso, y las relaciones conceptuales existentes. En nuestro caso para la implementación de nuestra Ontología usaremos el editor ontológico denominada Protege, esta es una herramienta Open Source desarrollada por la Universidad de Stanford en colaboración con la Universidad de Manchester [7]. La característica de este software es que es muy amigable, basado en un modelo similar a los sistemas orientados a objetos. Una de las ventajas de esta herramienta es que:

- Se definen las clases de forma jerárquica.
- Se definen las propiedades de cada clase.
- Se definen los valores permitidos que tiene cada característica.
- Se llenan las instancias, es decir atribuir individuos de una clase determinada.

En nuestro caso no reutilizaremos una Ontología existente por la naturaleza del caso. El código de la Ontología a crear en Protegé es OWL [16] que es el lenguaje más conocido de Ontologías. A continuación, en los siguientes apartados describiremos todos esos conceptos creados en nuestro modelo.

##### Clases y Subclases

Se entienden como conjuntos o conceptos que contienen individuos y pueden ser organizados en forma jerárquica conocida también como una

taxonomía, según Kohler [18] se posibilita el examen óptico de los minerales anisótropos bajo dos modos diferentes; Ortoscópico y Conoscopico, además se identificaron los siguientes conceptos principales: Minerales, Microscopio y Tipo de Iluminación. Así

sucesivamente se crean las otras subclases, según muestra la taxonomía de conceptos como se muestran en la figura 1.

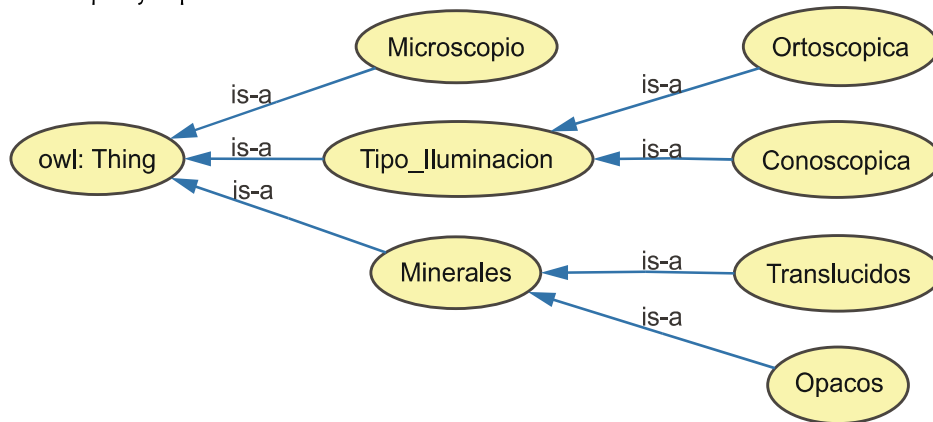


Figura 1: Taxonomía de conceptos

De la taxonomía se entiende que algunos conceptos como Opacos y Translucidos son subclases de la clase Minerales, los demás conceptos están relacionados de la misma manera en forma jerárquica, se observa que todas estas clases y subclases son hijas de una clase principal denominada Thing.

• **Propiedades**

Las propiedades representan relaciones entre dos objetos o individuos, existen dos tipos de propiedades que se pueden definir, la de objetos y del

tipo de datos. La propiedad de objetos nos permite relacionar un individuo con otro y la propiedad del tipo de datos [12] nos relaciona objetos con valores tipo dato como son: enteros, literales, etc.

En el caso de las propiedades tipo objeto, estas se caracterizan por tener un dominio y un rango. Como ejemplo tenemos la propiedad “analiza\_con\_luz\_transmitida”, que define aquellos objetos que pertenecen a una determinada categoría, se muestra en la figura siguiente dicha característica.

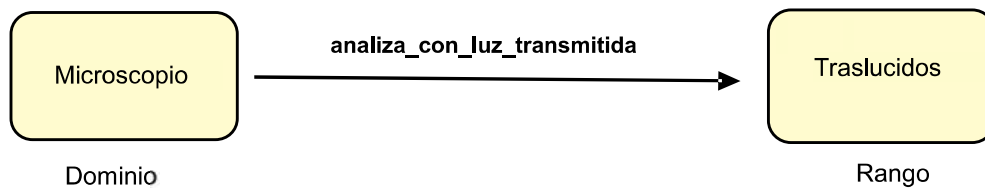


Figura 2: Características de la Propiedad de Objetos

De acuerdo al modelo conceptual de la Ontología, se identifican las propiedades de tipo objeto y tipo de dato, que se muestran a continuación en el editor Protege.



Figura 3: Propiedades de Datos

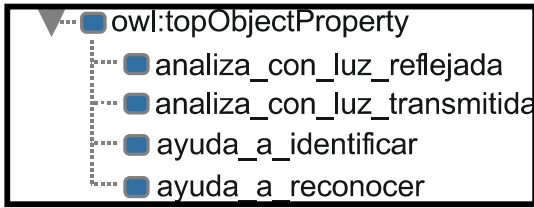


Figura 4: Propiedades de Objetos

• **Restricciones**

Con el fin de verificar el funcionamiento de la Ontología e inferir conocimiento se crean las restricciones, se pueden distinguir tres tipos de restricciones como: clases como restricciones, restricciones de propiedades tipo dato y restricciones de propiedades de objeto.

En nuestro modelo utilizamos restricciones de propiedades de objeto, como se muestra en la figura siguiente:

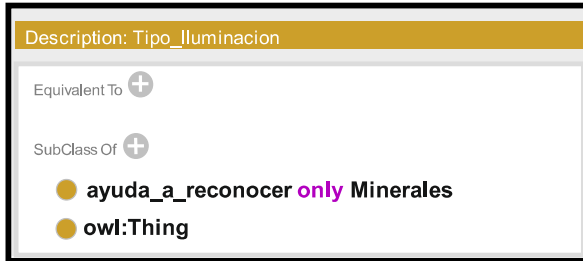


Figura 5: Restricción 1

De esta forma, se van generando las diversas restricciones en cada caso, para finalmente, una vez almacenada la mayor cantidad de instancias se procederá a hacer las consultas respectivas del caso, una vez validada la Ontología.

**Consultas a la Ontología**

Para las consultas respectivas se usará el SPARQL (SPARQL Protocol and RDF Query Language) [24], este es un lenguaje de consultas para RDF, y actualmente está siendo considerada como una recomendación del W3C para crear un lenguaje de consulta dentro de la Web Semántica, para ello se requiere el uso de cierta sintaxis especial, al no ser un lenguaje accesible para todos los usuarios. Según [25] explorar estos datos mediante lenguajes de consultas estructurados es bastante tedioso incluso para usuarios expertos. A partir de ello los autores presentan una metodología para traducir consultas en lenguaje natural hacia consultas SPARQL. A continuación, se muestra en la figura siguiente dicha consulta.

traslucidos	color
piroxeno	pleocroismo_suave
granate	pleocroismo_suave
anfíbol	pleocroismo_fuerte
cuarzo	incoloro

Figura 6: Consultas SPARQL

**5 CONCLUSIONES**

El presente trabajo constituye un primer esfuerzo a fin de contribuir en el reconocimiento de minerales utilizando las herramientas de la Web Semántica. En base a la Ontología diseñada se puede diseñar un Portal que nos muestre diversas propiedades de un mineral con las herramientas de Web Semántica. Se debe mencionar que una vez implementado dicho Portal, este serviría como una magnífica herramienta, para la identificación de minerales de las menas, pero siempre tendría que estar siendo supervisada por un experto, dado que existen algunos minerales que

pueden poseer algunas variantes en cuanto a sus propiedades físicas y microscópicas.

Una limitación que se presenta actualmente es que la realización de consultas en el lenguaje de consultas semántico es bastante complicada y se necesita conocer con más detalle la sintaxis de dicho lenguaje, se requiere de mecanismos más fáciles de extraer la información usando para ello el lenguaje natural. Como trabajo a futuro se pretende realizar las consultas con el uso del lenguaje natural en algún dominio.

**REFERENCIAS**

- [1] Bernaras A., Laresgoiti I, Corera J. (1996), Building and reusing ontologies for electrical network applications, in: Proc. European Conference on Artificial Intelligence (ECAI-96), Budapest, Hungary, pp. 298–302.
- [2] Berners-Lee, J. Hendler, O Lassila, 2001. The Semantic Web. *Scientific American* May 2001.
- [3] Corcho O, Fernández M, Gómez Asunción. Methodologies tools and languages for building ontologies. Where is their meeting point? *Data & Knowledge Engineering*. 2003; 46(1): 41-64
- [4] Ehlers, E. G. (1987). *Optical mineralogy Vol. 2. Mineral descriptions*. Palo Alto: Blackwell Scientific Publications.
- [5] Feldman HJ, Dumontier M, Ling S, et al. CO: A chemical ontology for identification of functional groups and semantic comparison of small molecules. *FEBS letters*. 2005; 579(21): 4685-4691.
- [6] Gomez-Perez, A., & Juristo, N. (1997). METHONTOLOGY: From Ontological Art Towards Ontological Engineering. In *Engineering Workshop on Ontological Engineering (AAAI97)*.
- [7] Grigoris Antoniou and Frank Van Harmelen. *A Semantic Web Primer*. Massachusetts Institute of Technology, 2008.
- [8] Grüninger, M., & Fox, M. S. (1995). Methodology for the design and evaluation of ontologies.
- [9] Jiménez J, Velilla N. “Óptica Mineral”: una herramienta informática para el estudio de los minerales en el microscopio petrográfico. *Enseñanza de las Ciencias de la Tierra*. 2004; 12(1): 57-61.
- [10] Kerr PF, Rogers AF. *Optical mineralogy*. 4<sup>th</sup> ed. New York: McGraw-Hill; 1977.
- [11] Lenat D, Guha RV. Cyc: A midterm report. *AI magazine*. 1990; 11(3): 32.
- [12] Liyang Yu. *Introduction to the Semantic Web and Semantic Web Services*. Chapman & Hall; 2007.
- [13] López MF, Gómez-Pérez A, Sierra JP, et al. Building a chemical ontology using methontology and the ontology design environment. *IEEE Intelligent Systems and their applications*. 1999; 14(1): 37-46.
- [14] Noy, N. F., & McGuinness, D. L. (2001). Ontology development 101: A guide to creating your first ontology. *OWL Web Ontology Language Overview*. <http://www.w3.org/TR/owl-features/>
- [15] PROTÉGÉ Ontology Editor and Knowledge Acquisition System <http://protege.stanford.edu/>
- [16] Kerr PF, Rogers AF. *Optical mineralogy*. 4<sup>th</sup> ed. New York: McGraw-Hill; 1977.
- [17] Raith M. M., Raase P. and Reinhardt J. (2011). *Guide to Thin Section Microscopy*. 107 pp. e-Book ISBN 978-3-00-033606-5 (PDF).
- [18] Sankar P, Alain K, Aghila G. Model tool to describe chemical structures in XML format utilizing structural fragments and chemical ontology. *Journal of chemical information and modeling*. 2010; 50(5): 755-770.
- [19] Saulnier AG, Giménez RG. Ontología de minerales: aplicación en el ámbito ambiental a los silicatos. *Boletín geológico y minero*. 2010; 121(3): 251-264.
- [20] Staab S, Schnurr HP, Studer R, et al. Knowledge processes and ontologies. *IEEE Intelligent Systems*. 2001; 16 (1): 26–34.
- [21] Swartout B., Ramesh B. Swartout K., Ramesh P., Knight K., Russ T., (1997) *Toward Distributed Use of Large-Scale Ontologies*, AAAI Symposium on Ontological Engineering, Stanford.
- [22] Uschold M, Gruninger M. Ontologies: Principles, methods and applications. *The knowledge engineering review*. 1996; 11(2): 93-136.
- [23] W3C World Wide Web Consortium (2007). “SPARQL Query Results XML Format “ Retrieved 10/08/2007, from: <http://www.w3.org/TR/rdf-sparql-XMLres/>
- [24] Yahya, M., Berberich, K., Elbassuoni, S., Ramanath, M., Tresp, V., & Weikum, G. (2012, July). Natural language questions for the web of data. In *Proceedings of the 2012 Joint Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing and Computational Natural Language Learning* (pp. 379-390). Association for Computational Linguistics.
- [25] Zagal-Flores, R., Torres-Ruiz, M., Ramírez-Romero, T., & Moreno-Ibarra, M. (2008). Diseño de una aplicación Web híbrida aplicada a servicios turísticos descritos semánticamente. Centro de Investigación en Computación, Instituto Politécnico Nacional.