

Université de Bourgogne



Compte Rendu du TP pour le cours Base de Données et Environnement
Distribué -M2 BDIA

Conception et Implémentation d'une ontologie Medicament

Sous la supervision de: Nadine Cullot

Réalisé par : NIBAREKE Thérance & Moussa Traoré

Janvier 2024

Table des matières

Table des matières	i
Introduction	1
1 MODELISATION DE L'ONTOLOGIE "MEDICAMENT"	3
1.1 Aperçu sur le Web Sémantique-Notion d'ontologie	3
1.2 Notion de T-Box et A-Box	4
1.3 Description Générale de l'ontologie "Medicament"	4
1.3.1 Commentaires sur le diagramme	5
1.4 Description des contraintes de cardinalités	6
1.5 Notion d'Axiome défini	7
2 IMPLEMENTATION DE L'ONTOLOGIE MEDICAMENT"	8
2.1 Outil :Protégé5	8
2.1.1 Subsumption de concepts	9
2.2 Consistence de l'ontologie et satisfiabilité d'un	10
2.3 Disjonction de concepts	10
2.4 Equivalence entre concepts	11
2.5 Principe de raisonnement en "Monde Ouvert"	11
2.6 Illustration du principe d'Unicité des noms	12
2.7 REGLES SWRL	12
2.8 REQUETES SPARKQL SUR L'ONTOLOGIE MEDICAMENT	12
2.8.1 liste des concepts et sous-concepts	12
2.8.2 Liste des propriétés ,domaines et ranges	13
2.8.3 Liste des fabricant dont le nom contient la lettre a	13
2.8.4 Individus et ages respectifs	13
2.8.5 Patients prenant un médicament spécifique	13

2.8.6	Médicaments ayant expiré ou périmés	13
Bilan et Conclusion		14

Introduction

Dans le domaine de la santé, la gestion et l'accessibilité à l'information sur les médicaments jouent un rôle crucial pour les professionnels de la santé, les patients et les chercheurs. Avec la croissance exponentielle des connaissances médicales, il devient impératif de mettre en œuvre des approches innovantes pour organiser, interconnecter et rendre ces informations accessibles de manière efficace.

Le projet que nous présentons s'inscrit dans cette perspective en utilisant les principes du Web sémantique pour développer une ontologie dédiée aux médicaments. L'objectif central est de créer une infrastructure sémantique qui permettra une représentation plus riche et interconnectée des données sur les médicaments, facilitant ainsi la recherche, l'analyse et la compréhension des informations médicales.

Ce projet a pour Objectifs :

- Modélisation Sémantique : Développer une ontologie détaillée qui capture les propriétés essentielles des médicaments, y compris leurs interactions, effets secondaires, les maladies pour lesquelles ils sont indiqués.
- Utiliser le langage SPARQL et les règles SWRL enrichir l'ontologie et tirer des connaissances à partir de l'ontologie pour produire des rapports et prendre des décisions plus éclairées.
- Évolutivité : Concevoir le système de manière à être évolutif, permettant l'ajout facile de nouvelles informations sur les médicaments à mesure que la recherche médicale progresse.

L'ontologie sur les médicaments est un outil efficace qui peut être utilisé par les professionnels de la santé, les patients, les décideurs du domaine

Ce rapport est structuré comme suit :

Le premier chapitre décrit l'ontologie médicament par un diagramme de classe sur lequel figure les concepts propriétés objets et données. Nous présentons ensuite l'implémentation de l'ontologie à l'aide de l'outil Protégé et le raisonneur Pellet.

Le troisième chapitre consiste à définir des règles permettant de faire des déductions et peupler de nouveaux concepts.

Le quatrième chapitre montre l'utilisation du langage SPARQL pour la recherche d'information

à partir de l'ontologie.

Chapitre 1

MODELISATION DE L'ONTOLOGIE "MEDICAMENT"

1.1 Aperçu sur le Web Sémantique-Notion d'ontologie

Le Web sémantique est une extension du World Wide Web visant à rendre les informations plus interconnectées et signifiantes pour les machines. Au cœur du web sémantique se trouve le concept d'**ontologie**, qui représente une spécification formelle et explicite des concepts dans un domaine donné ainsi que des relations entre ces concepts.

La modélisation sémantique concerne le développement de descriptions et de représentations des données pour rendre leur compréhension plus explicite, précise, agréée et comprise par des communautés de personnes mais aussi des systèmes numériques (applications).

Avec l'évolution de l'intelligence artificielle et de l'internet, les entreprises disposent de grandes quantités de données. Il est nécessaire de les nettoyer, les rendre cohérentes, les interconnecter, les comprendre pour être capable d'en tirer de la valeur ajoutée et prendre des décisions stratégiques.

Il existe une large variété de technologies et de langages de description permettant de mettre en place des modèles sémantiques et offrir les fonctionnalités essentielles :

- Le stockage (bases de données, bases de connaissances, bases de données graphes, triplestores, etc.)
- Le raisonnement (systèmes d'inférences logiques, règles, etc.)
- Le requêtage (différents langages de requêtes)

Au cours de ce projet, nous avons utilisé le langage **OWL** (Ontology Web Language) qui est basé sur une représentation formelle des connaissances en logique de description.

Un raisonneur Pellet permet de vérifier la consistance de l'ontologie pour détecter les contradictions possibles et assurer ainsi une certaine cohérence des données. Il est aussi capable de faire

des déductions soit à partir des concepts ou individus de l'ontologie.

Le langage OWL contient un certain nombre d'opérateurs permettant de créer l'ontologie.
-L'union entre concepts -Cardinalité -Existentielle -Négation.

1.2 Notion de T-Box et A-Box

L'ontologie est généralement divisée en deux parties : la T-Box (Terminological Box) qui décrit les concepts et les relations entre eux, et la A-Box (Assertional Box) qui spécifie les instances individuelles et leurs relations. Cette distinction facilite la modélisation et l'organisation des connaissances.

1.3 Description Générale de l'ontologie "Médicament"

L'ontologie "Médicament" est conçue pour représenter de manière exhaustive les informations liées aux médicaments.

Pour modéliser notre ontologie, nous avons dressé le diagramme UML (diagramme de classe). Ce diagramme offre une vue des concepts et leurs sous-concepts (liens d'hérédité) ainsi et de leurs relations entre concepts. Il illustre la structure hiérarchique des concepts, permettant une compréhension rapide des différents éléments de l'ontologie "médicament".

La figure 1.1 présente un exemple de diagramme de classe de l'ontologie "Médicament".

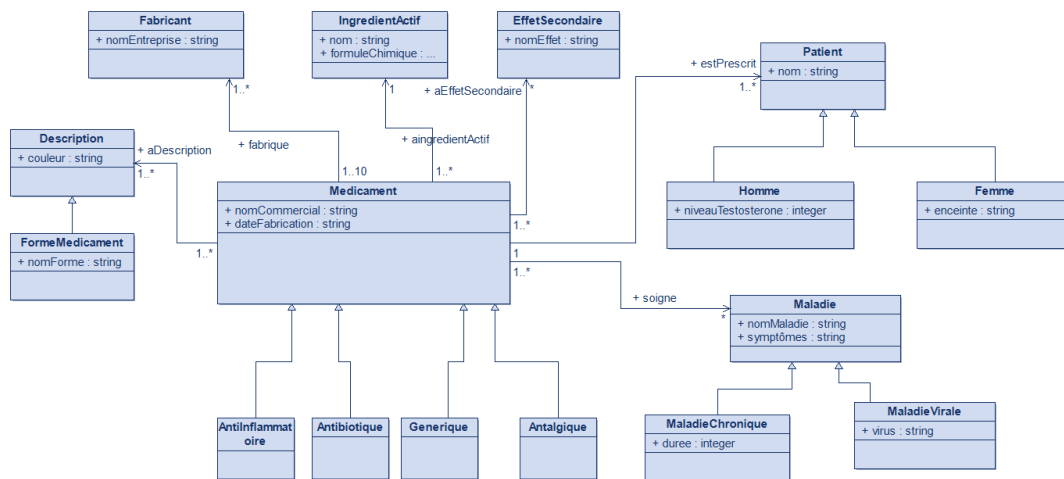


FIGURE 1.1 – Diagramme de classes pour l'ontologie Médicament

1.3.1 Commentaires sur le diagramme

A partir du diagramme de classe illustré sur la figure 1.1, nous pouvons remarquer que un médicament peut être soit une antibiotique, générique, anti-inflammatoire ou antalgique. Par ailleurs un médicament est fabriqué par une ou plusieurs entreprises qui peuvent être localisées en France (Fabricant local) ou hors de la France. Chaque médicament a exactement un ingrédient actif. Un médicament peut présenter des effets secondaires chez certains patients.

Un médicament est prescrit à un ou plusieurs patients pour soigner certaines maladies.

Nous avons choisi de séparer les patients "Homme" et "Femme" étant donné que certaines maladies se rencontrent chez une catégorie de patient. Par ailleurs nous distinguons aussi les patients "Enfants" (patients dont l'âge est inférieur ou égal à 10).

Un médicament a une description qui donne les détails comme la couleur. Le médicament se présente sous différentes formes (gélule, comprimé ou sirop liquide).

Le tableau 1.1 détaille la liste des concepts ainsi que les relations de subsumption entre eux.

Concepts et sous-concepts	
Concept	Sous-concept
EffetSecondaire	
Fabricant	
Description	FormeMédicament
IngrédientActif	
Maladie	MaladieVirale, MaladieChronique
Médicament	Antalgique, Antibiotique, Générique, AntiInflammatoire
Patient	Femme, Homme

TABLE 1.1 – Liste des concepts et sous-concept

Les concepts sont reliés entre eux par des liens appelés **Propriétés objets** ayant chacune un domaine (concept de départ) et un range (concept d'arrivée).

Le tableau 1.2 détaille la liste des propriétés objets de notre ontologie.

Propriétés objets			
nom propriété	Sous-propriété	Domain	Range
aDescription	aForme	Medicament	Description
aForme		Medicament	FormeMedicament
fabrique		Fabricant	Medicament
aIngredientActif		Medicament	IngredientActif
aEffetSecondaire		Medicament	EffetSecondaire
estPrescrit		Medicament	Patient
Soigne		Medicament	Maladie

TABLE 1.2 – Liste des propriétés objets

Dans l'environnement protégé, il est possible de définir les propriétés objets inverse qui inter-changent le domaine et le range de chaque propriété objet à l'aide du mot clé **inverseOf**

Les propriétés données sont les attributs de chaque concept. Elles permettront de distinguer les individus de chaque concept. Dans notre ontologie nous avons choisi les propriétés données suivantes :

- **Medicament** :nomCommercial,dateFabrication,dateExpiration,posologieRecommandée
- **EffeSecondaire** :nomEffet,gravite,durée
- **Fabricant** :nomEntreprise,adresse pays
- **IngredientActif** :Nom, formuleChimique
- **Patient** :nom,dateDeNaissance, poids, antecedantsMedicaux, groupeSanguin
- **Femme** :allaitante, Enceinte, niveauEstrogene n
- **Homme** :niveauTestosterone

Ces propriétés données pourront être utilisées pour définir de nouveaux concepts. Par exemple on pourrait définir le concept PatientSurpoids comme un patient ayant un poids supérieur ou égal à 120 Kg.

1.4 Description des contraintes de cardinalités

Les contraintes de cardinalités définissent le nombre d'instances d'une classe qui peuvent être liées à une autre par une relation particulière. Ces contraintes ajoutent une dimension plus précise à la modélisation, garantissant la cohérence et la qualité des données.

Par exemple Un médicament peut se trouver dans une ou plusieurs formes(gellule,comprimé,liquide). Si nous définissons une contrainte de cardinalité pour dire qu'un médicament a un seul ingrédient actif, le raisonneur s'assurera que cette contrainte soit respectée. Il sera alors impossible d'associer deux ou plusieurs ingrédients actifs à un même médicament.

Le langage OWL offre différentes cardinalités qui sont : some,only,max,min,exactly.

1.5 Notion d'Axiome défini

L'objectif ultime du Web sémantique est de permettre aux machines de traiter l'information de manière plus intelligente, en comprenant les relations entre les différentes données et en fournissant des résultats de recherche plus précis et pertinents. Cela ouvre la porte à des applications plus avancées telles que la recherche d'informations interconnectées, l'intégration de données provenant de sources diverses, et la création de connaissances basées sur le web.

Des règles logiques qui régissent les relations entre les concepts et les individus de l'ontologie. Ils renforcent la sémantique de l'ontologie en spécifiant des conditions qui doivent être satisfaites pour assurer une interprétation correcte des données.

La création de nouveaux axiomes se fait en utilisant la notion d'équivalence et des opérateurs comme l'intersection, les contraintes de cardinalités. Deux concepts sont dits équivalents si leurs interprétations sont équivalents.

Exemple de concept défini :

On peut définir un fabricantAntibiotique comme étant un fabricant qui ne fabrique que des médicaments de catégories antibiotiques. cela veut dire que tous les liens fabrique allant de du fabricant vont vers des médicaments antibiotiques.

Chapitre 2

IMPLEMENTATION DE L'ONTOLOGIE MEDICAMENT''

2.1 Outil :Protégé5

Nous avons utilisé l'outil **protegé dans sa version 5.2.0.**

Protégé est une plateforme open source pour le développement d'ontologies. Le raisonneur Pellet un rôle crucial dans le processus de raisonnement sur les ontologies. il est responsable de la déduction des informations implicites à partir des assertions explicites faites dans l'ontologie.

Il assure les fonctions suivantes :

- Inférence de classe et sous-classe
- Inférence de propriété
- Détection de contradictions
- Vérification de la cohérence

La figure 2.1 présente l'implémentation de notre ontologie dans l'environnement Protégé.

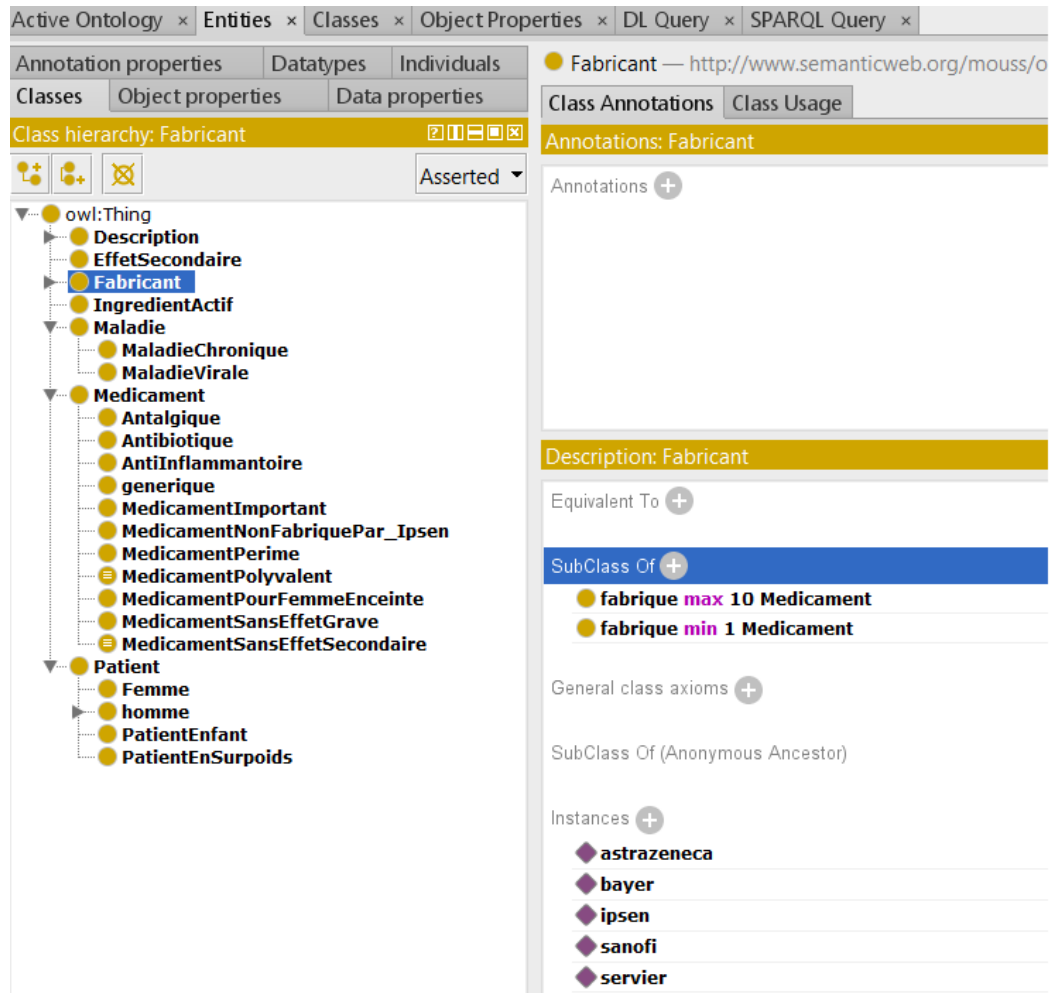


FIGURE 2.1 – Ontologie Medicament dans l’environnement Protégé

2.1.1 Subsumption de concepts

La subsumption permet de définir une relation d’héritage entre concepts. La figure 2.2 présente un exemple de subsumption à l’aide du mot clé **SubClassOf**

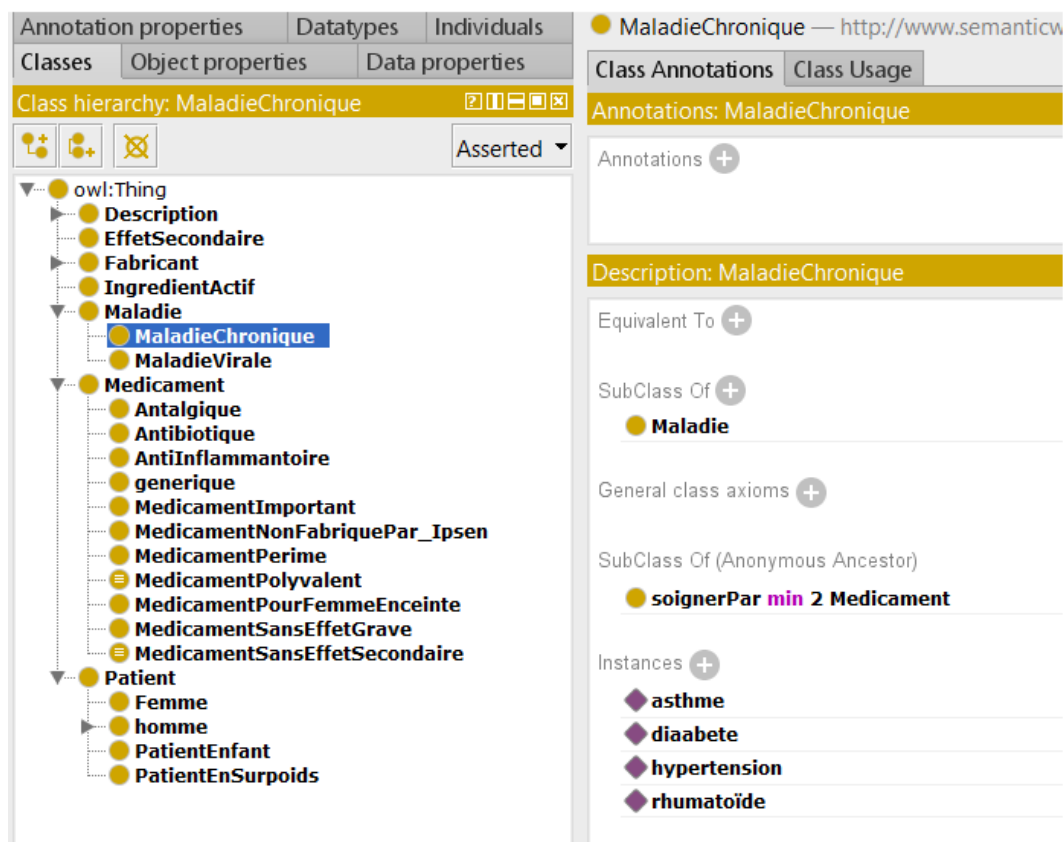


FIGURE 2.2 – Subsumption entre concepts

2.2 Consistence de l'ontologie et satisfiabilité d'un

L'ontologie est consistante si tous les concepts sont satisfiables. Par exemple étant donné que les concepts Homme et femme sont disjoints, un même individu ne peut pas être à la fois homme et femme.

2.3 Disjonction de concepts

Nous avons défini deux concepts disjoints qui sont sous-concepts de Patient. Nous pouvons dire que le concept Homme est disjoint du concept femme. L'intersection de leurs interprétations est vide.

2.4 Equivalence entre concepts

A l'aide de l'équivalence, nous avons défini de nouveaux concepts :

- `MedicamentPolyvalent` équivalent à un médicament qui soigne plus de 3 maladies différentes.
- `MedicamentSansEffetSecondaire` comme un médicament qui ne présente aucun effet secondaire.

La figure 2.3 présente la définition de nouveaux concepts à l'aide de l'équivalence

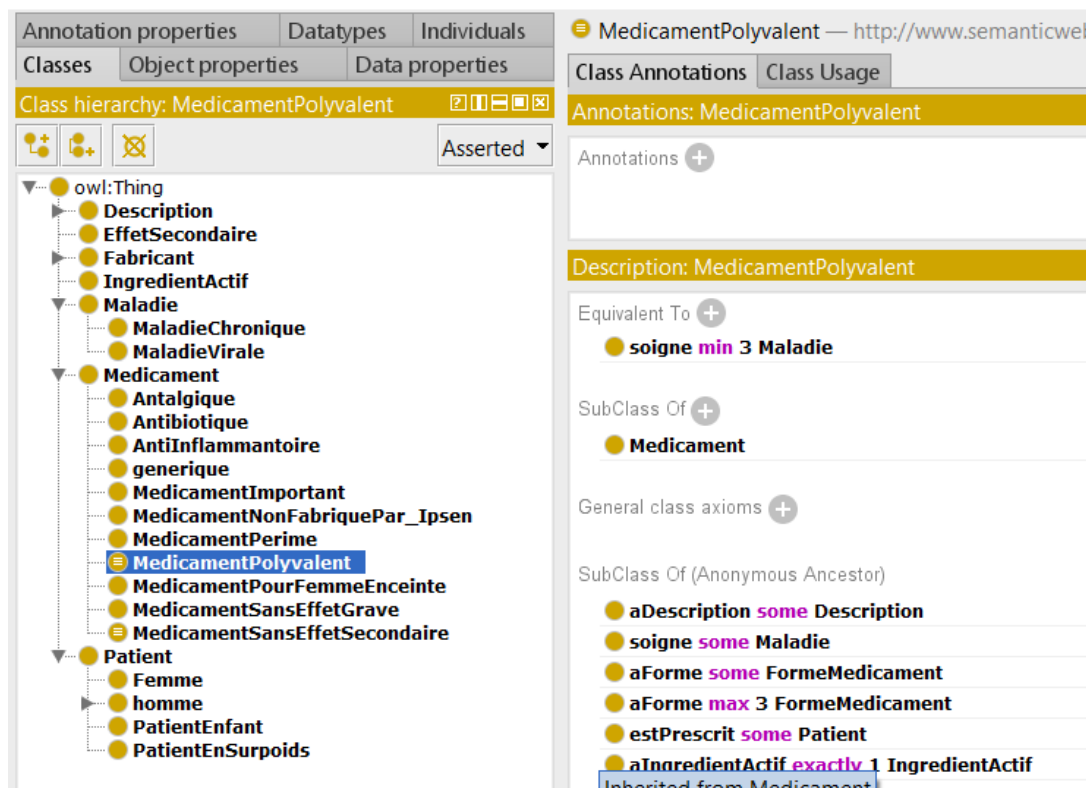


FIGURE 2.3 – Subsumption entre concepts

Le raisonneur fait aussi des déductions sur les concepts. Si un individu est du concept `Homme`, cet individu sera aussi `Patient` car `Homme` est subsumé par `Patient`.

2.5 Principe de raisonnement en "Monde Ouvert"

Le raisonneur Pellet fonctionne en monde ouvert. Ceci signifie que l'absence d'information sur un fait particulier ne signifie pas que ce fait est faux. Cela permet de représenter de manière

flexible les connaissances, en laissant la porte ouverte à de nouvelles informations qui pourraient être découvertes à l'avenir.

Dans notre ontologie, nous avons créé un concept défini `FabricantQueAntibiotique` qui est un fabricant ne produisant que des médicaments antibiotiques. L'hypothèse du monde ouvert suppose que ce fabricant peut fabriquer d'autres catégories de médicaments plutard.

Pour fermer le monde nous avons ajouté une contrainte pour fixer le nombre de médicaments fabriqués par ce fabricant.

2.6 Illustration du principe d'Unicité des noms

Deux individus sont supposés identiques par le raisonneur. Si nous prenons un médicament qui soigne des maladies `m1`, `m2` et `m3`. Le raisonneur suppose que `m1`, `m2` et `m3` sont identiques. Ce médicament ne sera pas individu du concept `MedicamentPolyvalent`. Pour y arriver, nous avons ajouté la contrainte `AllDisjoint` entre individus.

2.7 REGLES SWRL

La figure 2.4 présente la définition de règles SWRL

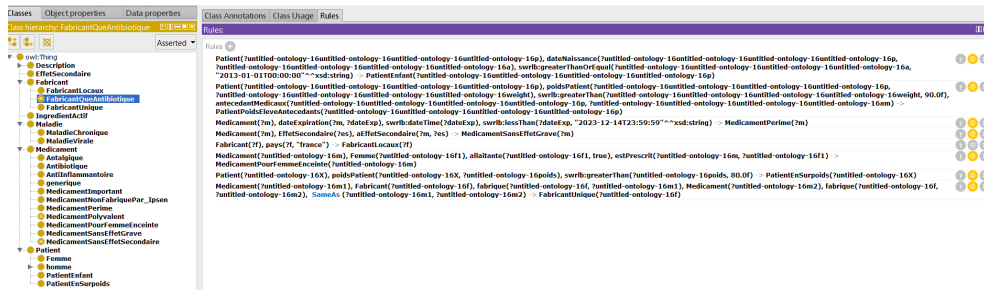


FIGURE 2.4 – Subsumption entre concepts

2.8 REQUETES SPARKQL SUR L'ONTOLOGIE MEDICAMENT

2.8.1 liste des concepts et sous-concepts

PREFIX `rdf` : `http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#`, PREFIX `owl` : `http://www.w3.org/2002/07/owl#`,
 PREFIX `rdfs` : `http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#`, PREFIX `xsd` : `http://www.w3.org/2001/XMLSchema#`

```
SELECT ?subject ?object WHERE { ?subject rdfs :subClassOf ?object }
```

2.8.2 Liste des propriétés ,domaines et ranges

```
SELECT ?p ?d ?r WHERE { ?p rdfs :domain ?d. ?p rdfs :range ?r }
```

2.8.3 Liste des fabricant dont le nom contient la lettre a

```
SELECT ?fabricant WHERE { ?fabricant rdf :type :Fabricant. ?fabricant :nomEntreprise ?n.  
FILTER regex( ?n,"a","i")  
}
```

2.8.4 Individus et ages respectifs

```
SELECT ?nomPatient ?dateNaissance (YEAR(now()) - YEAR( ?dateNaissance) AS ?age) WHERE  
{ ?patient a :Patient . ?patient :dateNaissance ?dateNaissance . ?patient :nomPatient ?nomPatient  
. }
```

2.8.5 Patients prenant un médicament spécifique

```
SELECT ? nomPatient ?nomMédicament WHERE { ?patient a :Patient . ?patient :prendsMe-  
dicaments ?médicament . ?médicament a :Médicament . ?patient :nomPatient ?nomPatient . ?me-  
dicament :nomCommercial ?nomMédicament . }
```

2.8.6 Médicaments ayant expiré ou périmés

```
sparql SELECT ?type (COUNT( ?médicament) AS ?count) WHERE { ?médicament a ?type  
. ?type rdfs :subClassOf* :Médicament . ?médicament :dateExpiration ?dateExpiration . FILTER  
( ?dateExpiration < "2024-01-07T00 :00 :00"8sd :dateTime) Remplacez cette date par la date  
actuelle } GROUP BY ?type ORDER BY DESC( ?count)
```


Bilan et Conclusion

Ce projet nous a permis de mettre en pratique les notions d'ontologie et expérimenter le principe du raisonneur Pellet