RELATÓRIO DE ATIVIDADES

Uma Infraestrutura de e-Science voltada à Gestão da Qualidade de Água na Bacia do Rio Doce

Bolsistas: Henrique Almeida de Oliveira, Luiz Eduardo Marchiori

Orientadores: João Paulo Andrade Almeida; Julio Cesar Nardi; Victorio Albani de Carvalho

1. PROPOSTA DE PESQUISA

Durante as 25 primeiras semanas de projeto, até o dia 24 de junho, os bolsistas do projeto, juntamente com os orientadores, decidiram como seriam os passos do projeto. Inicialmente, revisou-se os principais conceitos da Web Semântica e como trabalhar com ontologias, em seguida conheceu-se a biblioteca python RDFlib, logo após se deu início a escrita dos algoritmos de busca e por fim a estruturação do guia prático da ontologia.

Inicialmente, para entender mais sobre o que ia ser feito, foi lido o livro Dados Abertos Conectados (ISOTANI, BITTENCOURT, 2015). Neste livro, possui os conceitos sobre dados abertos, taxonomia, padrões de RDF, triplas, OWL, ontologias e outros, que servem de base para trabalhar nessa área.

Depois de ter entendido a parte teórica inicial, foi feito uma aprofundação no software Protégé (STANFORD, 2014). Neste software, é possível visualizar os arquivos em formato turtle e também criar novas classes, indivíduos, validar dados, criar restrições e também executar outras formas de manipulação na ontologia.

Após essa primeira experiência no manuseio de ontologias, foi iniciada a escrita dos códigos de pesquisa na linguagem Python, tendo como base de dados a ontologia IntegraDoce (ALMEIDA, 2019). Os primeiros algoritmos criados implementavam os seguintes filtros: (i) - Pesquisa por intervalo de data, (ii) - Pesquisa por região geográfica, (iii) - Pesquisa por qualidade medida e (iv) - Pesquisa por qualidade medida.

O guia prático foi organizado no Jupyter Notebook (JUPYTER PROJECT, 2015) para poder ser disponibilizado de uma forma em que o usuário pudesse ver o conteúdo teórico e em seguida testar ele na prática, no código no bloco seguinte. Ele foi finalizado nas semanas após o dia 24 de junho e revisado até o fim do projeto ao final de julho, juntamente com o relatório final de atividades.

De acordo com a estrutura do relatório, é apresentado na seção 2 os conceitos observados no segundo e terceiro parágrafos desta seção de introdução. Na terceira seção, são apresentados os primeiros esforços no uso da biblioteca rdflib e os resultados presentes no guia prático.

2. TRABALHANDO COM ONTOLOGIAS

Como revisado no livro Dados Abertos Conectados (ISOTANI, BITTENCOURT, 2015), uma ontologia visa estabelecer sistematicamente uma linha conceitual, ou seja, em ciências da computação ela é a especificação explícita de uma conceitualização. Dessa forma, uma ontologia permite que tanto uma máquina como um ser humano entendam uma conceitualização feita através de uma ontologia.

Dessa forma, para a Web Semântica, cuja ideia original é estender a Web atual, a descrição dos dados e documentos atuais para que máquinas possam também entender e processar essa vasta coleção de informações é possível através do uso de ontologias, dada sua aplicabilidade para descrever dados conectados.

Durante o projeto, os bolsistas estudaram até a sétima semana no material de referência os livros de Dados Abertos e vídeos sobre ontologias. Após isso fez-se uso da ferramenta Protégé, até o fim da sétima semana, para implementar ontologias de teste, como a ontologia de Pizza (MIROIR, 2018).

2.1. REPRESENTAÇÃO DO CONHECIMENTO

Primeiramente foram revisados os conceitos que norteiam a Web-Semântica, entre eles a importância do uso de dados abertos. O grande volume de dados digitais existentes torna fundamental a sua estruturação (TIM BERNERS LEE, 2001), o método apresentado como solução para este é o framework RDF (Resource Description Framework) apresentado através de um grafo como o da Figura 1.



Figura 1 – Exemplo de um grafo RDF.

Um grafo normalmente tem diversas triplas como a da figura 1, em Dados Abertos Conectados (ISOTANI, BITTENCOURT, 2014) destaca que as informaçãos de recursos, a estrutura <sujeito>, cpredicado> e <objeto> do grafo, é responsável principalmente pela descrição semântica da informação dos recursos e é atribuída de uma URI (Uniform Resource Identification), que pode ser:

- URL (Uniform Resource Locator), onde basicamente define um endereço para um determinado recurso através de um protocolo existente;

- URN (Unified Resource Name) representa um nome para um determinado recurso, garantindo unicidade e persistência de forma global mesmo quando o recurso não está disponível;
- IRI (International Resource Identifier) que é uma generalização do URI. Diferente do URI que é baseado nos caracteres ASCII, o IRI amplia o número de caracteres para incluir Chineses (kanji) e Japoneses (hiragana e katakana), bem como os caracteres Cirílicos e Coreanos.

2.2 DESENVOLVIMENTO DE ONTOLOGIAS

Trabalhar por meio de ontologias é um dos modos encontrados de estruturar os dados abertos e, segundo Guimarães e Diniz (2015), a importância de criar uma Ontologia tem relação direta com a criação de uma Rede de Dados Abertos, para que os dados estruturados possam ser publicados e conectados pela web de modo padronizado, incentivando a inovação social facilitado pela web.

Meena Uni e Baskaran (2012) citam que a ontologia é uma especificação formal e explícita de uma conceitualização de um domínio de interesse que é utilizado como estrutura de comunicação entre pessoas e sistema, desse modo, quando se fala de dados abertos conectados, informações existentes na web podem ser combinadas para que um usuário consiga fazer pesquisas no futuro no domínio ao qual pertence a ontologia.

Desse modo, quando se deseja tratar uma grande quantidade de dados abertos, e esse número de dados é maior que a capacidade de interpretação humana, organizar o conhecimento relacionado a esses dados em uma ontologia. Tornar esses dados estruturados e conectados é uma tarefa que envolve gerenciar, coletar, modelar e padronizar para então consumir dados adequadamente, tornando possível automatizar os processos (BITTENCOURT; ISOTANI, 2015).

3. IMPLEMENTAÇÃO

O RDFLib é um pacote Python de código aberto para tratamento de triplas RDF (Resource Description Framework) utilizado durante todo o trabalho. Ele contém a maioria das funções necessárias para trabalhar com RDF como, por exemplo: analisadores e serializadores para RDF/XML, N3, NTriples, N-Quads, Turtle, TriX, Trig e JSON-LD.

Uma interface gráfica pode ser gerada pelo RDFLib, ela pode armazenar implementações para endpoints SPARQL na memória, também suporta consultas SPARQL 1.1 e instruções de atualização de mecanismos de extensão da função SPARQL. Para a

instalação do RDFLib é necessário importar a biblioteca pelo PIP (Package Installer for Python), o instalador de pacotes do Python. Um passo a passo da instalação do pacote pode ser consultado na documentação do RDFLib 6.1.1 em Getting started with RDFLib. (https://rdflib.readthedocs.io/en/stable/gettingstarted.html).

Para implementação dos algoritmos do projeto, foi necessário estudar as relações entre os objetos na ontologia. Todo objeto da ontologia doce se relaciona ainda com gUFO, uma ontologia desenvolvida por Almeida (2019) que serve de base para implementação de outras ontologias. Na Figura 2, é apresentado o diagrama utilizado na implementação das triplas das medições Insitu (realizadas no local).

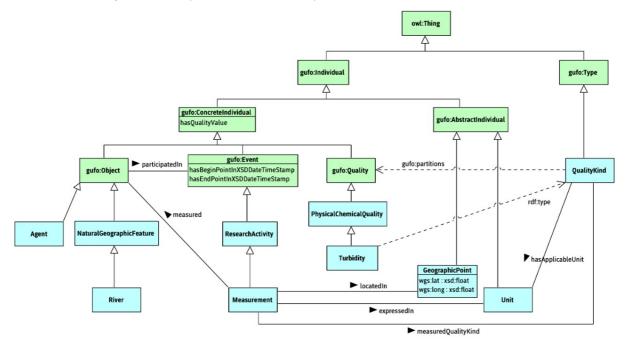


Figura 2 — Diagrama de medições Insitu

Da semana 8 (oito) à semana 24 (vinte e quatro), isto é, do dia 21 (vinte e um) de maio até o dia 17 (dezessete) de junho, foram desenvolvidos os algoritmos de busca para a IntegraDoce com os mecanismos de filtragem indicados por Rabbi (2019). O guia prático foi montado com base neste nas semanas seguintes, além dele foi montado um guia de instalação do Jupyter Notebook em Linux e Windows.

3.1 ALGORITMOS DE BUSCA

Após o aprendizado sobre o Colab Notebook, que foi descartado na segunda semana, foi utilizado como ambiente de desenvolvimento o Jupyter Notebook, com tutorial de instalação no Anexo I (para Windows) e no Anexo II (para Linux), e utilizada a biblioteca python RDFLib, os algoritmos começaram a ser montados levando primeiro em conta filtros

gerais. durante a décima e décima primeira semanas, os filtros elaborados foram estabelecidos pelos orientadores, mas após estas eles passaram a ser realizados com base no artigo de Rabbi (2019).

Os parâmetros de filtragem escolhidos foram: (i) localização geográfica da coleta da amostra de água; (ii) data da coleta da amostra de água; (iii) propriedade medida; e (iv) laboratório responsável pela medição. Os resultados obtidos no projeto para essas pesquisas são apresentados nas figuras de 3 a 6, os algoritmos de busca de cada um desses parâmetros.

```
def pesqTempo (graph, ini, fin):
# cria um grafo
   x = Graph()
   for s1, p1, o1 in graph.triples((None, RDF.type, DOCE.Measurement)) :
      for s2, p2, o2 in graph.triples((s1, GUFO.hasBeginPointInXSDDateTimeStamp, None)) :
           dateo2 = str(o2)
           dateo2 = dateo2.replace('-0200', '')
           dateo2 = dateo2.replace('-0300', '')
           dateComp = datetime.fromisoformat(dateo2)
           if ((dateComp.year >= ini.year) and (dateComp.year <= fin.year) and (dateComp.month >=
ini.month) and (dateComp.month <= fin.month) and (dateComp.day >= ini.day) and (dateComp.day <=
fin.day)) :
               for s21, p21, o21 in graph.triples((s1, GUFO.hasEndPointInXSDDateTimeStamp, None)) :
 dateo2 = dateo2.replace('-0300', '')
                  dateComp = datetime.fromisoformat(dateo2)
                   if ((dateComp.year >= ini.year) and (dateComp.year <= fin.year) and</pre>
(dateComp.month >= ini.month) and (dateComp.month <= fin.month) and (dateComp.day >= ini.day) and
(dateComp.day <= fin.day)) :</pre>
                      x.add((s1, p1, o1))
                       for s3, p3, o3 in graph.triples((None, GUFO.participatedIn, s1)) :
                       for s3, p3, o3 in graph.triples((s1, DOCE.locatedIn, None)) :
                       for s3, p3, o3 in graph.triples((s1, DOCE.measured, None)) :
```

Figura 3 – Pesquisa em intervalo de data

```
def pesqLocalizacao(graph, latMin, latMax, longMin, longMax):
   x = Graph()
   flag = 1
    for s1, p1, o1 in graph.triples((None, None, DOCE.GeographicPoint)) :
       lat = graph.value(s1, WGS.lat)
       long = graph.value(s1, WGS.long)
        if lat < Literal(latMax, datatype=XSD.float) and lat > Literal(latMin, datatype=XSD.float) :
           if long < Literal(longMax, datatype=XSD.float) and long > Literal(longMin,
datatype=XSD.float) :
               for s4, p4, o4 in graph.triples((None, DOCE.locatedIn, s1)) :
                    for s5, p5, o5 in graph.triples((s4, RDF.type, DOCE.Measurement)) :
                        for s6, p6, o6 in graph.triples((None, GUFO.participatedIn, s5)) :
                           flag=0
                           x.add((s6, p6, o6))
                        for s6, p6, o6 in graph.triples((s5, DOCE.measuredQualityKind, None)) :
                            x.add((s6, p6, o6))
                            for s7, p7, o7 in graph.triples((s5, DOCE.expressedIn, None)) :
                            for s3, p3, o3 in graph.triples((s1, DOCE.measured, None)) :
                            for s7, p7, o7 in graph.triples((s5, DOCE.hasQualityValue, None)) :
DOCE.hasBeginPointInXSDDateTimeStamp, None)) :
   if flag :
       print("\nNão foram encontrados resultados")
```

Figura 4 — Pesquisa em região geográfica

```
def pesqQualidade(exampleTriples, qualk):
   x = Graph()
   flag = 1
   for s1, p1, o1 in exampleTriple.triples((None, RDF.type, DOCE.Measurement)) :
       for s2, p2, o2 in exampleTriple.triples((s1, DOCE.measuredQualityKind, None)) :
           med = str(o2)
           med = med.replace(str(DOCE),"")
               for s3,p3,o3 in exampleTriple.triples((None, GUFO.participatedIn, s1)) :
               for s3,p3,o3 in exampleTriple.triples((s1, DOCE.locatedIn, None)) :
               for s3,p3,o3 in exampleTriple.triples((s1, DOCE.expressedIn, None)) :
               for s3, p3, o3 in exampleTriple.triples((s1, DOCE.measured, None)) :
                   x.add((s3, p3, o3))
               for s3,p3,o3 in exampleTriple.triples((s1, GUFO.hasQualityValue, None)) :
               for s3,p3,o3 in exampleTriple.triples((s1, GUFO.hasBeginPointInXSDDateTimeStamp,
   if flag :
       print("\nNão foram encontrados resultados")
```

Figura 5 — Pesquisa por qualidade medida

```
def PesqAgent(exampleTriple, pesquisa):
# Cria o grafo
    x = Graph()
# Flag para indicar que não encontrou resultados
    flag = 1
# Laço para filtrar o sujeito, tendo como predicado o tipo RDF, e o objeto a relação Agent
    for s1, p1, o1 in exampleTriple.triples((None, RDF.type , DOCE.Agent)) :
# Cria uma variável de laboratório e transforma em string
        lab = str(s1)
        lab = lab.replace(str(DOCEEX),"")
# faz a comparação se o dado pasado pelo usuário está presente na base de dados
        if pesquisa in lab :
# laço para filtrar o objeto, o sujeito é o resultante do primeiro laço e o predicado da relação
participatedIn
        for s2, p2, o2 in exampleTriple.triples((s1, GUFO.participatedIn, None)) :
# cria uma variável de laboratório e transforma em string
        med = str(o2)
        med = med.replace(str(DOCEEX),"")
# adicionar instâncias com sujeito a doce:measurement encontrada
```

Figura 6 — Função pesquisa por qualidade medida

Os algoritmos retornam uma nova ontologia em formato turtle que possui somente as medições com os filtros apresentados. Além disso, eles podem ser usados em sequência para realizar filtros a partir de outros filtros, como filtrar as medições em uma região em um período de tempo, em qualquer sequência.

3.2 GUIA PRÁTICO

O Guia prático foi montado com base nos algoritmos apresentados na seção 3.1 e também nas atividades desenvolvidas durante o projeto, de modo que são apresentados exemplos antes de introduzir os algoritmos de interações com a ontologia Integra Doce. Ele apresenta inicialmente o projeto e as tecnologias utilizadas, bem como os seus participantes e objetivos.

Antes de apresentar os algoritmos apresentados na seção anterior, o guia tutorial apresenta a ontologia e suas triplas de grafos de relações, exemplificando o diagrama apresentado na Figura 2. Em seguida, são mostrados os primeiros algoritmos com funções básicas da biblioteca RDFLib, e, por fim, os algoritmos de interação com a Integradoce.

4. CONCLUSÃO

A proposta da pesquisa foi concluída, foi feito um tutorial para usuários que possuem pouca experiência com RDFLib e Python, com o propósito de entender o que cada função faz, o que é o RDFLib, o que são triplas, como navegar nas triplas e como utilizar o RDFLib para iterar nas triplas.

Foi utilizado o Jupyter Notebook para realizar o tutorial e a plataforma GitHub para armazenar o arquivo do notebook (onde contém o tutorial para o usuário), um trecho da base de dados da ontologia e arquivos com tutorial para instalação do notebook no Linux e no Windows.

O projeto apresenta alguns códigos possíveis para esses filtros citados anteriormente. Os algoritmos podem ser adaptados para qualquer outra ontologia desde que seja citado o projeto nas referências. Outros trabalhos poderão ser acrescentados aos materiais de referência no tutorial, dado a frequência de uso do RDFLib utilizando a linguagem Python para manipular ontologias.

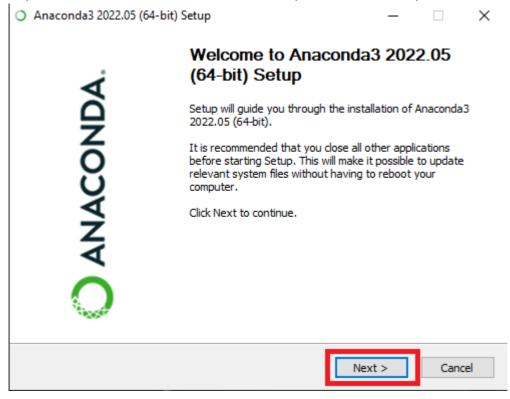
ANEXO I — TUTORIAL DE INSTALAÇÃO DO ANACONDA (WINDOWS)

VERSÃO: 1.0

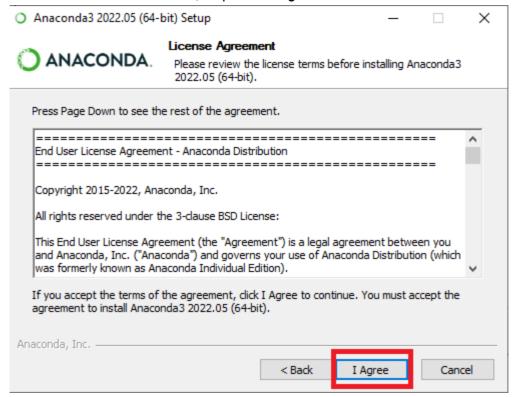
Instalando o Jupyter Notebook no Windows

Essa seção inclui instruções como instalar o Jupyter Notebook. Existem várias interfaces de usuário do Jupyter que podem ser usadas, mas a recomendada é utilizar o programa chamado Anaconda para instalar o python e o notebook.

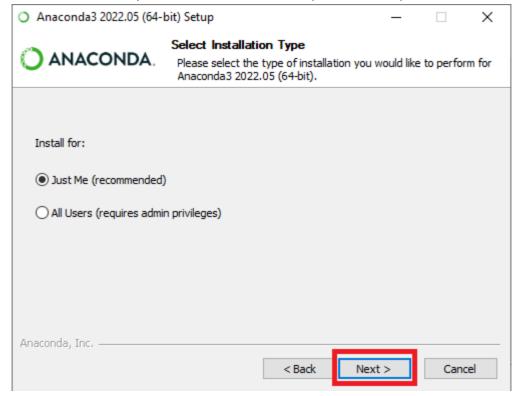
- O Anaconda instala o python, o jupyter notebook e outros pacotes utilizados para computação científica e ciência de dados. Para efetuar a instalação deste programa, siga os seguintes passos:
 - 1- Faça o download do Anaconda diretamente pelo site ou através do endereço https://repo.anaconda.com/archive/Anaconda3-2022.05-Windows-x86_64.exe 594MB.
 - 2- Depois de ter feito o download execute o arquivo baixado e clique em Next.



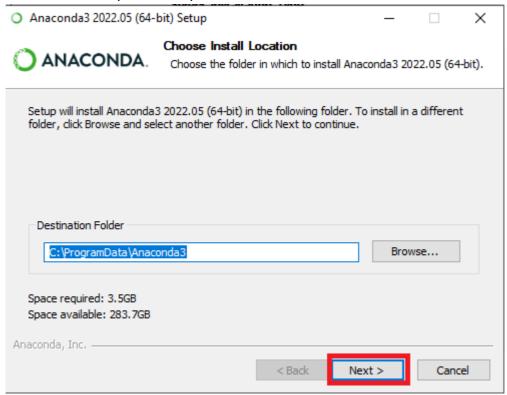
3- Se concordar com os termos, clique em *l Agree*.



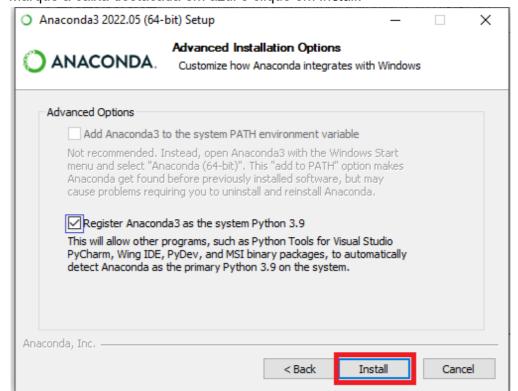
4- Você irá escolher se o programa será instalado apenas para o usuário que está sendo utilizado, ou para todos os usuários. Depois disso clique em *Next*.



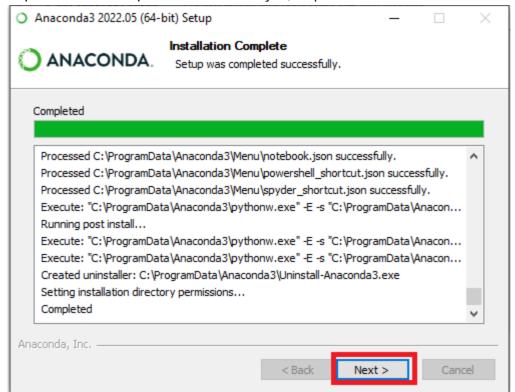
5- Selecione a pasta de destino onde irá ocorrer a instalação do Anaconda, caso queira deixar o diretório padrão, clique em *Next*.



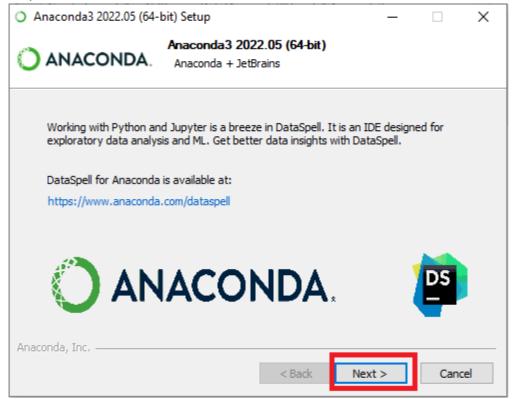
6- Marque a caixa destacada em azul e clique em Install.



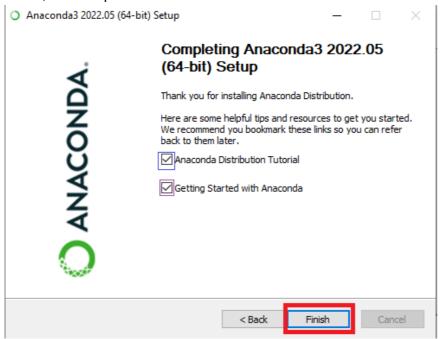
7- Depois de acabar o processo de instalação, clique em Next.



8- Clique em Next.



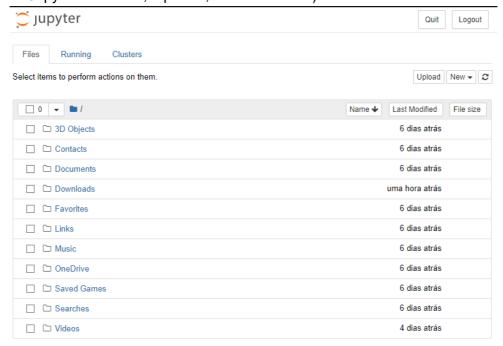
9- Caso não queira ver o tutorial do Anaconda, desmarque a caixa destacada de azul. Caso não queira que o Anaconda abra a aba do Getting Started depois de clicar em *Finish*, desmarque a caixa destacada em roxo.



10- Abra o arquivo chamado Jupyter Notebook (Anaconda 3)



11- Depois disso, irá abrir uma aba no seu navegador padrão com o sistema de arquivos do Jupyter Notebook, e pronto, está instalado :)



ANEXO II — TUTORIAL DE INSTALAÇÃO DO ANACONDA (LINUX)

VERSÃO: 1.0

Instalando o Jupyter Notebook no Linux

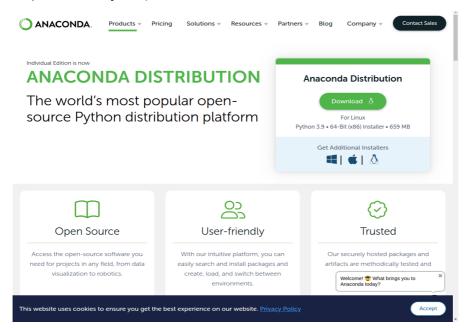
Essa seção inclui instruções como instalar o Jupyter Notebook. Existem várias interfaces de usuário do Jupyter que podem ser usadas, mas a recomendada é utilizar o programa chamado Anaconda para instalar o Python e o Notebook.

O Anaconda instala a versão mais recente do python, o jupyter notebook e outros pacotes utilizados para computação científica e ciência de dados. Para efetuar a instalação deste programa, siga os seguintes passos:

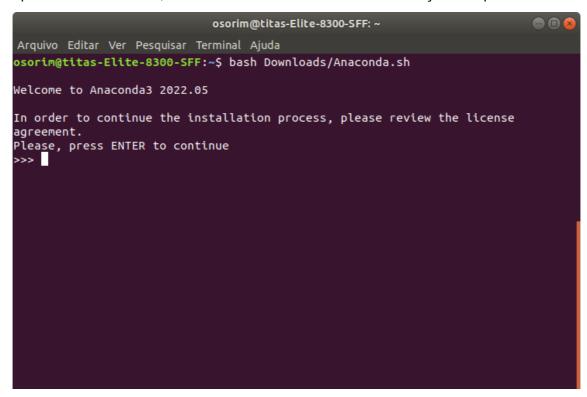
1- Certifique-se que possui as dependências necessárias para instalação do Anaconda ao executar o comando correto no prompt de acordo com a sua distribuição Linux.



2- Após executar o comando, faça download do Anaconda para Linux diretamente do site ou pelo endereço https://www.anaconda.com/download/#linux.



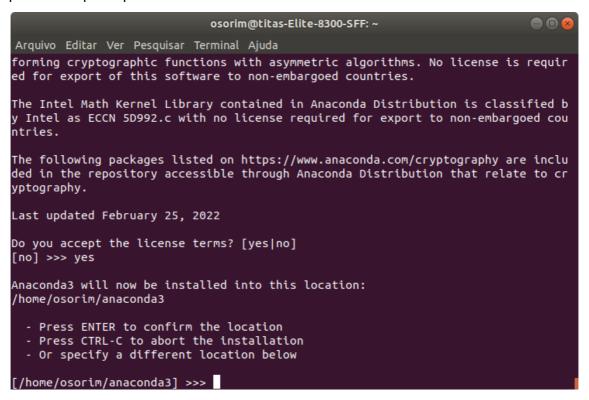
3- Após fazer o download, execute o comando bash com o endereço do arquivo baixado.



4- Após concordar com a licença, basta seguir pressionando a tecla enter. Deve aparecer novamente esse termo, onde deverá ser digitados *yes*.



5- Após concordar com a licença, você deverá especificar o destino da pasta, que por padrão é a pasta pessoal do usuário.

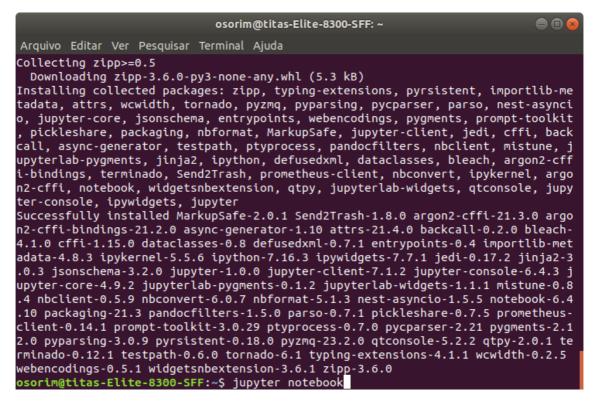


6- Quando a instalação terminar, o instalador vai pedir se você deseja inicializar o Anaconda3, você poderá digitar *no* já que nosso objetivo é instalar o Jupyter.

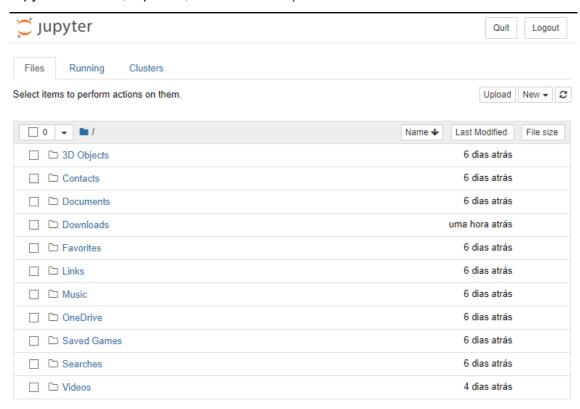
```
osorim@titas-Elite-8300-SFF: ~
                                                                            Arquivo Editar Ver Pesquisar Terminal Ajuda
  zope.interface
                     pkgs/main/linux-64::zope.interface-5.4.0-py39h7f8727e_0
                     pkgs/main/linux-64::zstd-1.4.9-haebb681_0
  zstd
Preparing transaction: done
Executing transaction: \
    Installed package of scikit-learn can be accelerated using scikit-learn-inte
lex.
    More details are available here: https://intel.github.io/scikit-learn-intele
    For example:
        $ conda install scikit-learn-intelex
        $ python -m sklearnex my_application.py
installation finished.
Do you wish the installer to initialize Anaconda3
by running conda init? [yes|no]
[no] >>>
```

7- Após terminar o programa, executamos o código de instalação do jupyter, através do comando *conda install -c anaconda jupyter*.

8- Após a execução da instalação, o notebook poderá ser aberto com o comando *jupyter* notebook.



9- Depois disso, irá abrir uma aba no seu navegador padrão com o sistema de arquivos do Jupyter Notebook, e pronto, está instalado :)



REFERÊNCIAS

- 1. ALMEIDA, João Paulo A. **The doce water quality ontology.** Disponível em: https://nemo.inf.ufes.br/projetos/integradoce/ >
- 2. ALMEIDA, J. P. A. et al. gUFO: A Lightweight Implementation of the Unified Foundational Ontology (UFO). 2019. Disponível em: https://nemo-ufes.github.io/gufo/.
- BROETTO, Dhiego Santos. Uma Apresentação Web para Apresentação de Dados de Qualidade de Água do Rio Doce. Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo – UFES. Vitória. 2022.
- 4. FERREIRA, Thiago Castro. Introdução a Ontologias e à Web Semântica (LIG948D). Faculdade de Letras - Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), 2020. Disponível em: https://www.youtube.com/watch?v=XLV416Gjl4g&list=PLLrIHSmC0Mw6lEj060psXrt3BSATBFVzV
- 5. ISOTANI, Seiji. BITTENCOURT, Ig Ibert. **Dados Abertos Conectados**. Novatec, Creative Commons. 2015. Disponível em: https://ceweb.br/livros/dados-abertos-conectados/>
- 6. Jupyter Project. Jupyter Trademark, 2015. Disponível em: < https://jupyter.org/ >
- 7. Miroir, Jean-Claude. (2018). Guia prático de construção de ontologias Protégé v. 5.2. 10.13140/RG.2.2.31922.96969.
- 8. STANFORD. 2014. Protégé Ontology Editor. [Online] 2014. http://protege.stanford.edu/.
- RABBI, Vinicius Teixeira. Portal De Dados Sobre A Qualidade Da Água Do Rio Doce: Um Protótipo Funcional. Curso de Pós-graduação lato sensu em Conectividade e Tecnologias da Informação. IFES — Campus Colatina, 2019
- 10. **rdflib 6.1.1 documentation**. RDFLib Team, 2021. Disponível em: < https://rdflib.readthedocs.io/en/stable/ >