Publicación de datos FAIR

Mikel Egaña Aranguren

mikel-egana-aranguren.github.io

mikel.egana@ehu.eus

Publicación de datos FAIR

https://github.com/mikel-egana-aranguren/UM-Bioinformatics-MSc-FAIR-data

Publicación de datos FAIR

git clone https://github.com/mikel-egana-aranguren/UM-Bioinformatics-MSc-FAIR-data.git

Indice

Introducción

Principios FAIR: una mejor publicación de datos (Científicos)

Para humanos y **máquinas**

No es un estándar

No promueven una tecnología concreta

Introducción

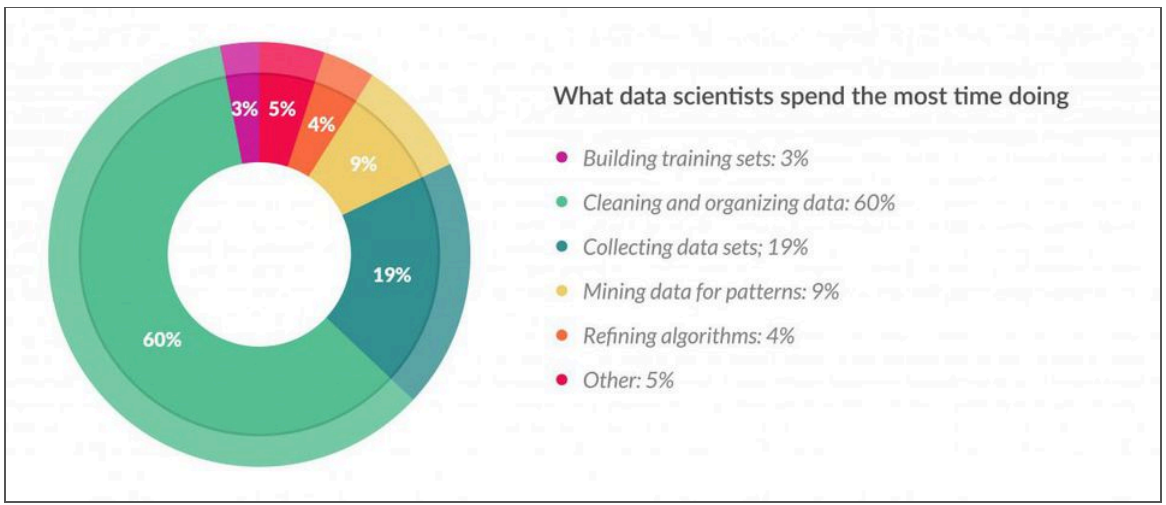
Son principios **guía**

No se cumplen de manera binaria (aprobado o no)

Un sistema siempre puede ser "más FAIR"

Introducción

80% del tiempo buscando, filtrando, masajeando e integrando datos



"Cleaning Big Data: Most Time-Consuming, Least Enjoyable Data Science Task, Survey Says" [FORBES, 2020-11-19]

Introducción

La reproducibilidad es **crucial** en ciencia:

- Reproducir: ejecutar un experimento/estudio con los mismos datos/materiales
- Replicar: ejecutar un experimento/estudio con nuevos datos/materiales

Introducción

Crisis de la reproducibilidad debido a:

- Datos no publicados
- Datos publicados de manera inadecuada

Introducción

Principios FAIR para una mejor publicación de **(meta)datos**

Wilkinson, M., Dumontier, M., Aalbersberg, I. et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. Sci Data 3, 160018 (2016)

Introducción

Cada vez más agencias gubernamentales exigen cumplir los principios FAIR a la hora de publicar los resultados cientificos para recibir financión (Data Management Plans): Horizon Europe, OpenAIRE, etc.

Open Data Europa para medir la calidad de los metadatos

Iniciativas del Espacio Europeo de Datos como GAIA-X

Introducción

Ley Orgánica del Sistema Universitario (LOSU): artículo 12 (Fomento de la Ciencia Abierta y Ciencia Ciudadana)

Estrategia Nacional de Ciencia Abierta 2023-2027 (ENCA) como objetivo estrategico

Grandes empresas como Novartis, Bayer, BASF, SIEMENS ENERGY etc. usan principios FAIR para publicación interna de datos

Principios FAIR

Findable

Accesible

Interoperable

Reusable

Findable

F1. (Meta)Data are assigned a globally unique and persistent identifier

F2. Data are described with rich metadata (R1)

F3. Metadata clearly and explicitly include the identifier of the data it describes

F4. (Meta)Data are registered or indexed in a searchable resource

Accesible

A1. (Meta)Data are retrievable by their identifier using a standardized communications protocol

A1.1 The protocol is open, free, and universally implementable

A1.2 The protocol allows for an authentication and authorization procedure, where necessary

A2. Metadata are accessible, even when the data are no longer available

Interoperable

I1. (Meta)Data use a formal, accessible, shared, and broadly applicable language for Knowledge Representation

I2. (Meta)Data use vocabularies that follow FAIR principles

I3. (Meta)Data include qualified references to other (Meta)Data

Reusable

R1. (Meta)Data are richly described with a plurality of accurate and relevant attributes

R1.1. (Meta)Data are released with a clear and accessible data usage license

R1.2. (Meta)Data are associated with detailed provenance

R1.3. (Meta)Data meet domain-relevant community standards

Principios y ejemplos

Las tecnologías para implementar los principios FAIR no son los principios FAIR

Findable

Data should be identified using globally unique, resolvable, and persistent identifiers, and should include machine-actionable contextual information that can be indexed to support human and machine discovery of that data

F1. (Meta)data are assigned a globally unique and persistent identifier

Globally unique

Dominios como um.es (€)

Registros

Algoritmos (UUID)

etc.

Persistent

Infraestructura propia (€€€): por ejemplo W3C URI Persistence Policy

Registros: identifiers.org, DOI, Orcid, Zenodo, etc.

HTTP URIs

URI: Uniform Resource Identifier (RFC 3986)

Identifica un recurso (URL: Localiza un documento)

HTTP: podemos usar HTTP para acceder (**Resolver**) a esa URI (dominio)

Identifiers for the 21st century: How to design, provision, and reuse persistent identifiers to maximize utility and impact of life science data

McMurry JA, Juty N, Blomberg N, Burdett T, Conlin T, et al. (2017) PLOS Biology 15(6): e2001414. https://doi.org/10.1371/journal.pbio.2001414

papers/journal.pbio.2001414.pdf

F1. Ejemplos

- https://orcid.org/0000-0001-8888-635X
- **doi**:10.4121/uuid:5146dd06-98e4-426c-9ae5-dc8fa65c549f - https://doi.org/10.4121/UUID:5146DD06-98E4-426C-9AE5-DC8FA65C549F
- http://www.uniprot.org/uniprot/P98161
- http://omim.org/entry/173900

F1. Nuestro ejemplo hipotético

Nuestro laboratorio de la UM ha descubierto un gen nuevo, PKD1, implicado en enfermedades renales de los humanos

La UM tiene un repositorio persistente de datos

URI del dataset: https://um.es/dataset/UMGenesDataset

URI de un gen: https://um.es/data/LDD773322

F2. Data are described with rich metadata (defined by R1 below)

Añadir metadatos lo más detallados posible

Metadatos de contenido: a qué especies pertenecen los genes, la temática de los datos, etc.

Metadatos técnicos: cuándo se generaron los datos, como, por quién, etc.

F2. Data are described with rich metadata (defined by R1 below)

Se usan ontologías (I1)

Repositorios de ontologías: Linked Open Vocabularies, OBO Foundry, BioPortal, BioSchemas, etc.

F3. Metadata clearly and explicitly include the identifier of the data it describes

"https://um.es/dataset/UMGenesDataset was generated on 2020-12-10T13:00:07"

"https://um.es/dataset/UMGenesDataset is about genes"

"https://um.es/dataset/UMGenesDataset relates to humans"

etc.

F4. (Meta)data are registered or indexed in a searchable resource

Repositorios generales: Zenodo, DataDryad, Dataverse (Harvard Dataverse), etc.

Repositorios temáticos: UniProt, GenBank, etc.

Indexadores como Google

Indexación

Google indexa de manera "básica" ...

... pero cada vez menos, gracias a Schema (Ontología muy ligera para describir datos en la web) y JSON-LD: Bioschemas

Hay que intentar publicar buenos metadatos para una indexación adecuada (por Google o cualquier agente que *entienda* las ontologías que usamos)

Accesible

Identified data should be accessible, optimally by both humans and **machines**, using a clearly-defined protocol and, if necessary, with clearly-defined rules for authorization/authentication

A1. (Meta)data are retrievable by their identifier using a standardized communications protocol

Por ejemplo HTTPS

A1.1 The protocol is open, free, and universally implementable

Por ejemplo HTTPS

A1.2 The protocol allows for an authentication and authorization procedure, where necessary

Hacer explícitas las condiciones físicas de acceso, para humanos y **máquinas**

Datos protegidos por propiedad intelectual o privacidad (Ej. datos clínicos): no se publican los datos, sólo (algunos) metadatos y sus condiciones de acceso

A2. Metadata are accessible, even when the data are no longer available

Conservar datos es muy caro

Conservar metadatos es mucho más barato

Si los datos ya no existen, deberíamos ser explícitos sobre ello, por ejemplo para evitar búsquedas innecesarias

Interoperable

Data becomes interoperable when it is machine-actionable, using shared vocabularies and/or ontologies, inside of a syntactically and semantically machine-accessible format

I1. (Meta)data use a formal, accessible, shared, and broadly applicable language for Knowledge Representation

Las máquinas también tienen que *entender* los (meta)datos

Por ejemplo OWL (Web Ontology Language)

I2. (Meta)data use vocabularies that follow FAIR principles

Las ontologías usadas para describir los datos también se tienen que publicar siguiendo los principios FAIR

I3. (Meta)data include qualified references to other (meta)data

Los (meta)datos son solo útiles cuando los integramos con otros datos

Enlaces explícitos a otros datos: "part-of", "catalyses", etc.

Las máquinas entienden el significado de esa relación

Reusable

Reusable data will first be compliant with the F, A, and I principles, but further, will be sufficiently well-described with, for example, contextual information, so it can be accurately linked or integrated, like-with-like, with other data sources. Moreover, there should be sufficiently rich provenance information so reused data can be properly cited

R1. Meta(data) are richly described with a plurality of accurate and relevant attributes

R1.1. (Meta)data are released with a clear and accessible data usage license

R1.2. (Meta)data are associated with detailed provenance

R1.3. (Meta)data meet domain-relevant community standards

R1. Meta(data) are richly described with a plurality of accurate and relevant attributes

F2 es para descubrir datos, R1 es para decidir si los datos son útiles

R1. Meta(data) are richly described with a plurality of accurate and relevant attributes

Describe the scope of your data: for what purpose was it generated/collected?

Mention any particularities or limitations about the data that other users should be aware of

R1. Meta(data) are richly described with a plurality of accurate and relevant attributes

Specify the date of generation/collection of the data, the lab conditions, who prepared the data, the parameter settings, the name and version of the software used

Is it raw or processed data?

R1. Meta(data) are richly described with a plurality of accurate and relevant attributes

Ensure that all variable names are explained or self-explanatory (i.e., defined in the research field's controlled vocabulary)

Clearly specify and document the version of the archived and/or reused data

R1.1. (Meta)data are released with a clear and accessible data usage license

I es sobre interoperabilidad técnica; R1.1 es sobre interoperabilidad legal

Los datos deben tener una licencia clara y explícita para humanos y máquinas

Por ejemplo, Creative Commons RDF

R1.2. (Meta)data are associated with detailed provenance

¿Cómo, quién, cuándo, por qué generó los datos?

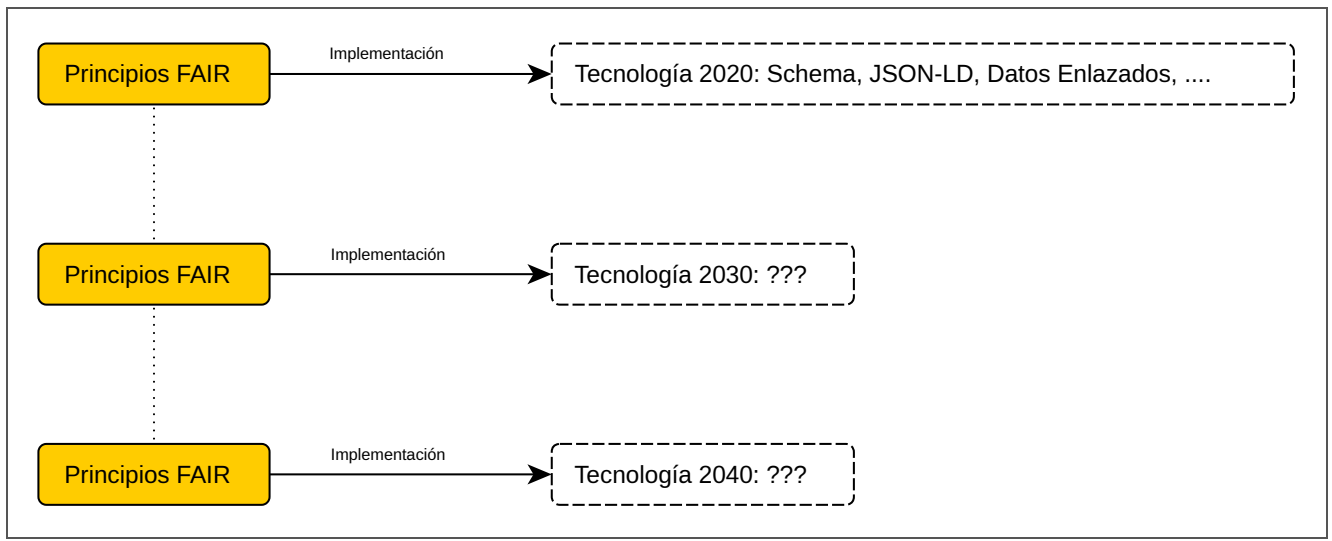
PROV-O: The PROV Ontology

R1.3. (Meta)data meet domain-relevant community standards

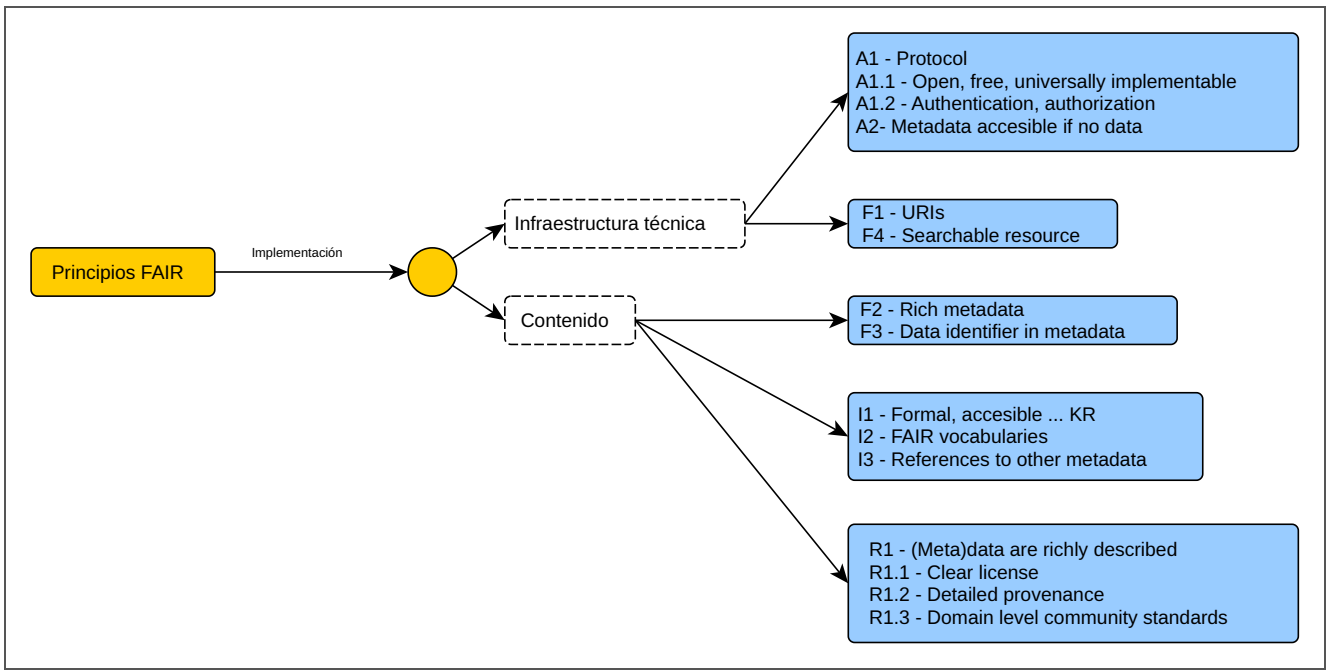
Respetar las buenas prácticas, estándares, vocabularios etc. de la comunidad científica que trabaja con esos datos

Por ejemplo FAIR Sharing Standards

Principios FAIR vs implementación



Principios FAIR: implementación



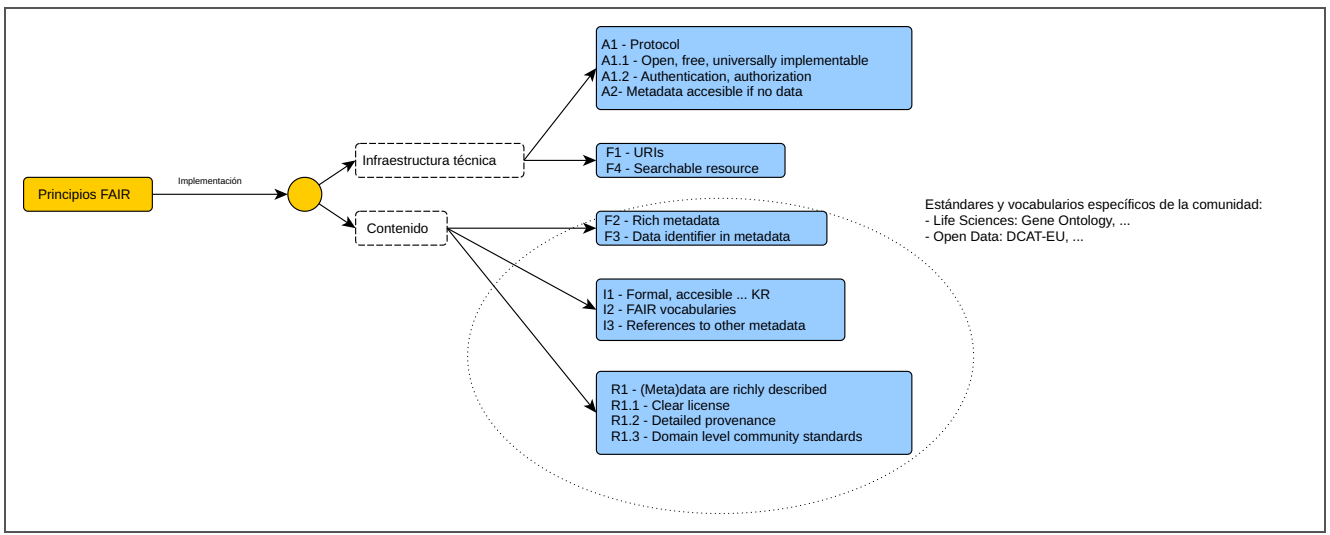
Madurez FAIR

A design framework and exemplar metrics for FAIRness

https://github.com/FAIRMetrics/Metrics

FAIR Evaluation Services

Madurez FAIR



Proyectos, Empresas, y centros

Personal Health Train Network (1812.00991.pdf)

FAIR Data Systems

The Hyve

Eccenca GmbH

Dutch Tech Centre for Life Sciences (DTL)

Recursos sobre FAIR en internet

The FAIR cookbook

GO FAIR foundation

FAIR Sharing

FAIR-DOM

Publicacion datos FAIR

Hay muchas maneras de publicar datos siguiendo los principios FAIR, dependiendo de la tecnologia: API REST, Linked Data, Linked Data Fragments, FAIR Data Point, ...

Estas soluciones se ocupan de la parte *técnica*

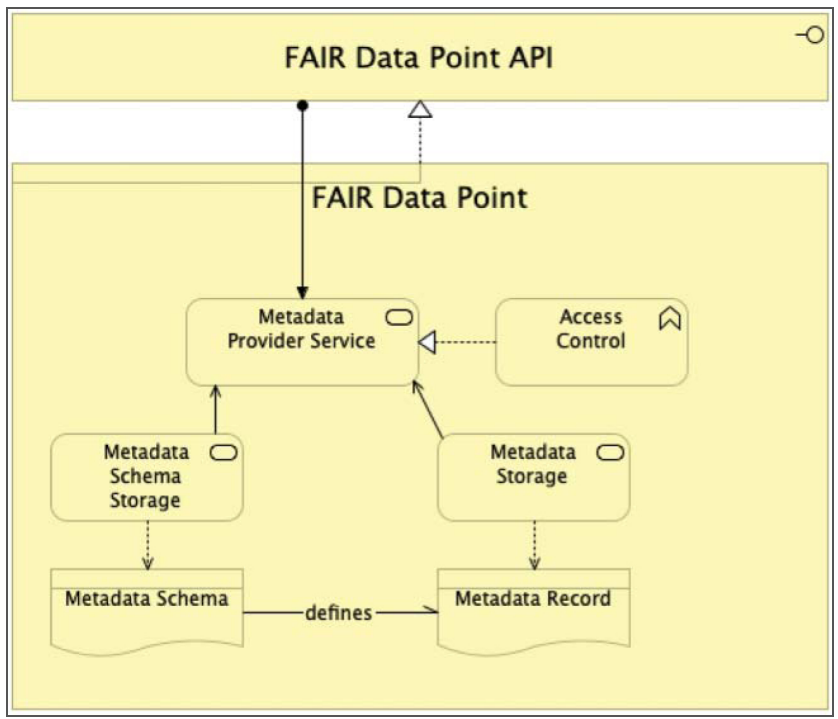
Pero no suficiente: hay que producir contenido FAIR (Metadatos, Ontologías, URIs, etc.)

FAIR Data Point

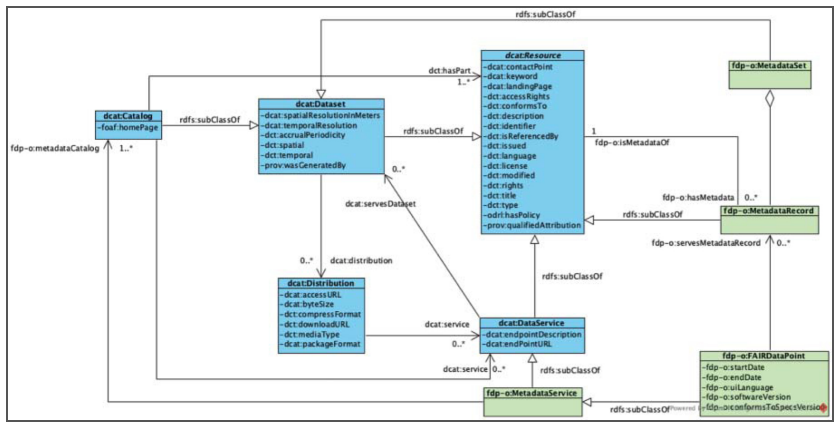
FDP

FAIR Data Point: A FAIR-Oriented Approach for Metadata Publication

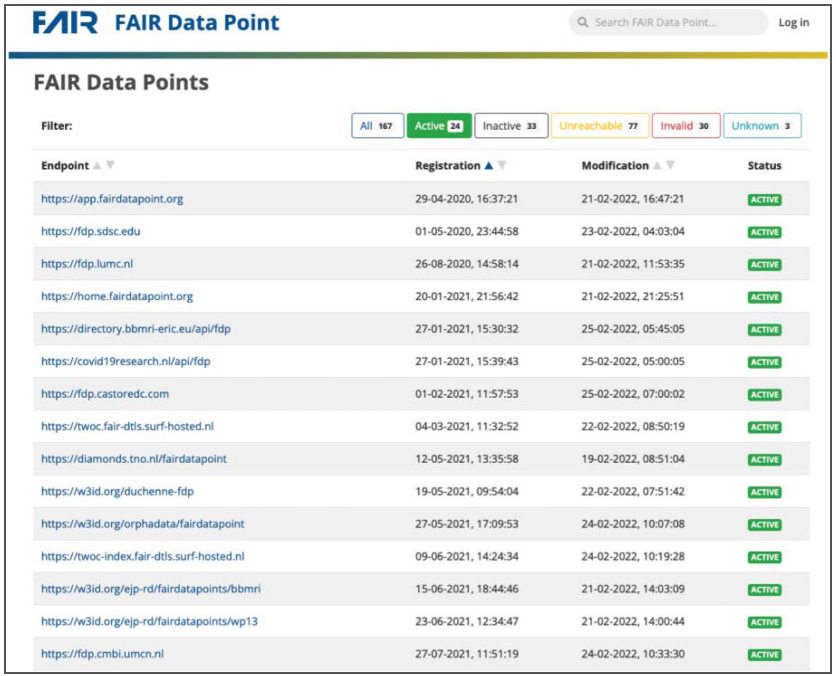
FAIR Data Point



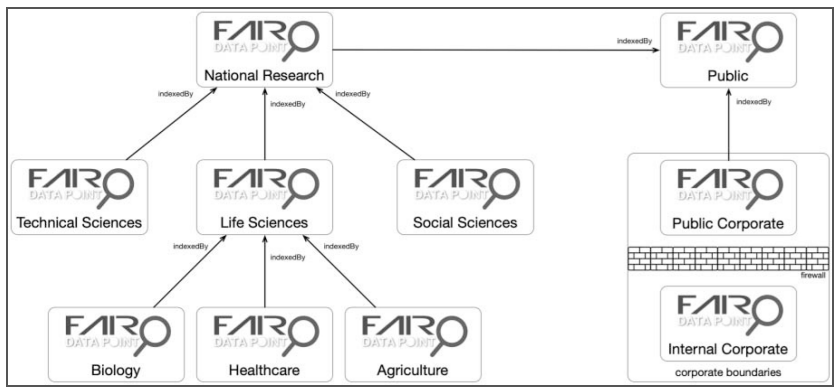
FAIR Data Point



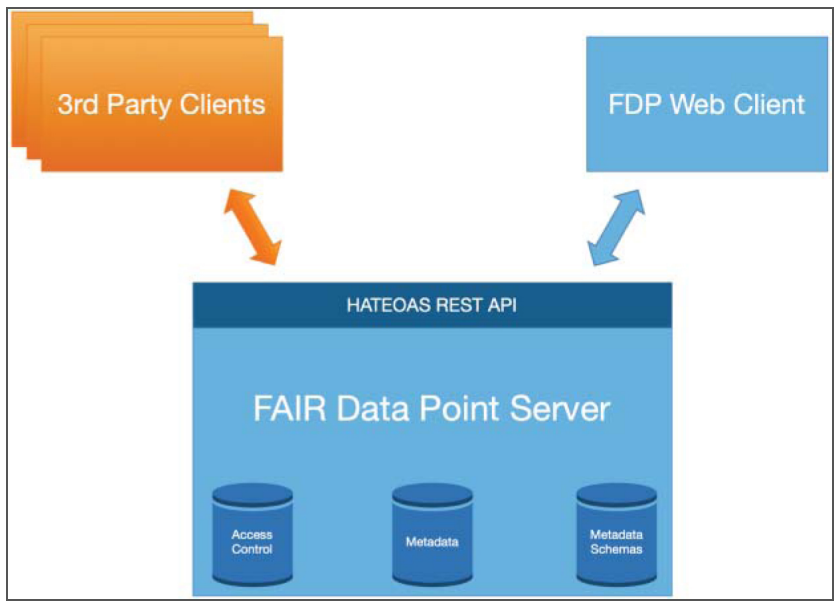
FAIR Data Point



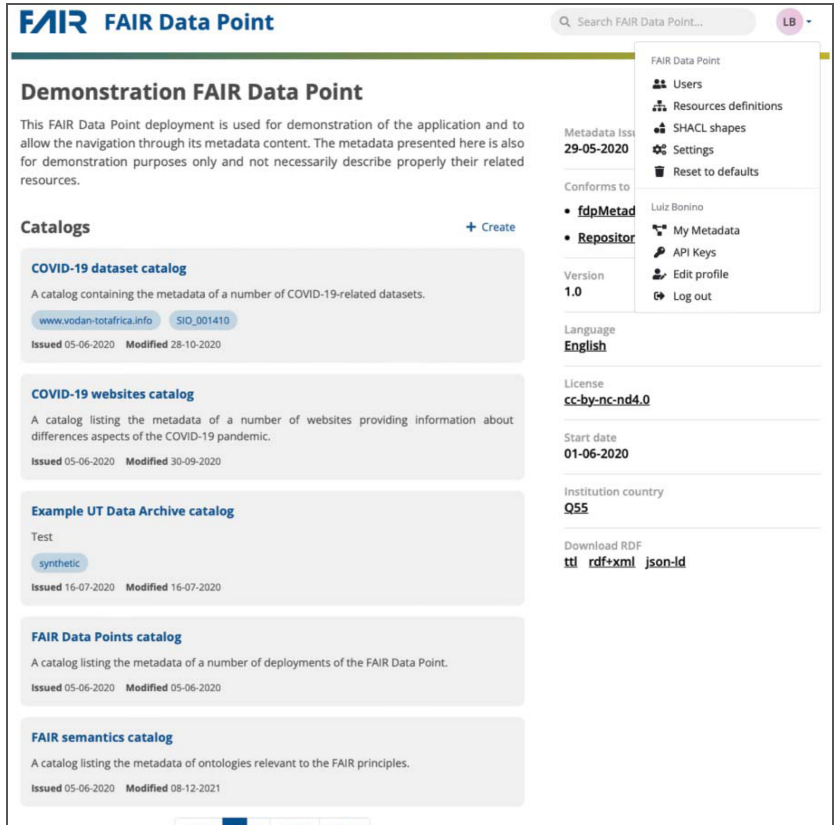
FAIR Data Point



FAIR Data Point



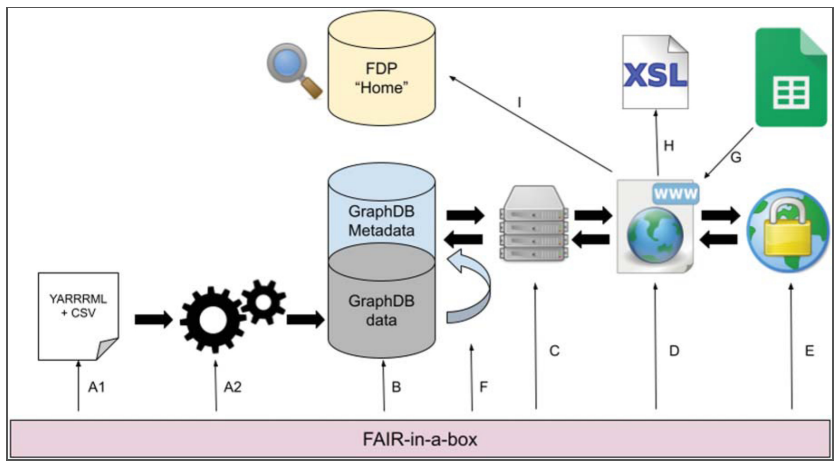
FAIR Data Point



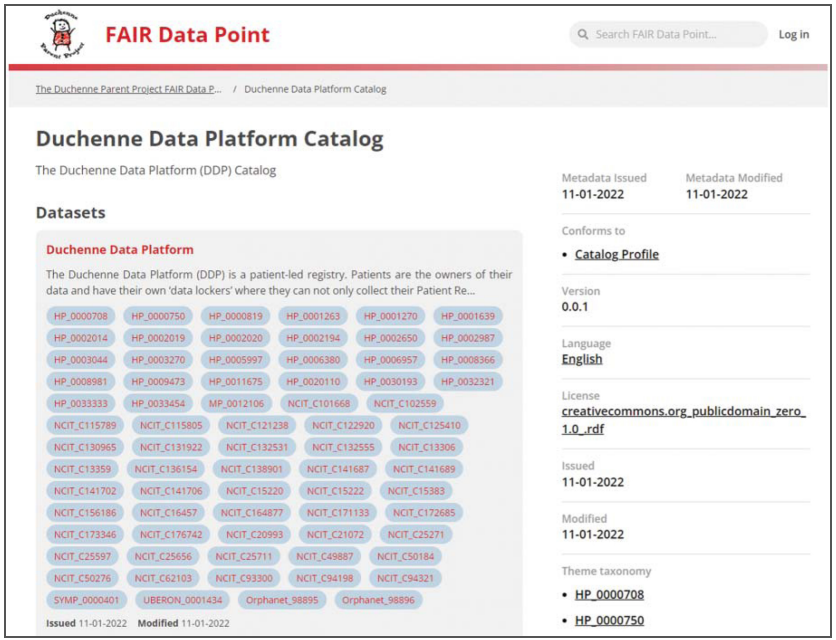
FAIR Data Point

The FAIR Data Point: Interfaces and Tooling

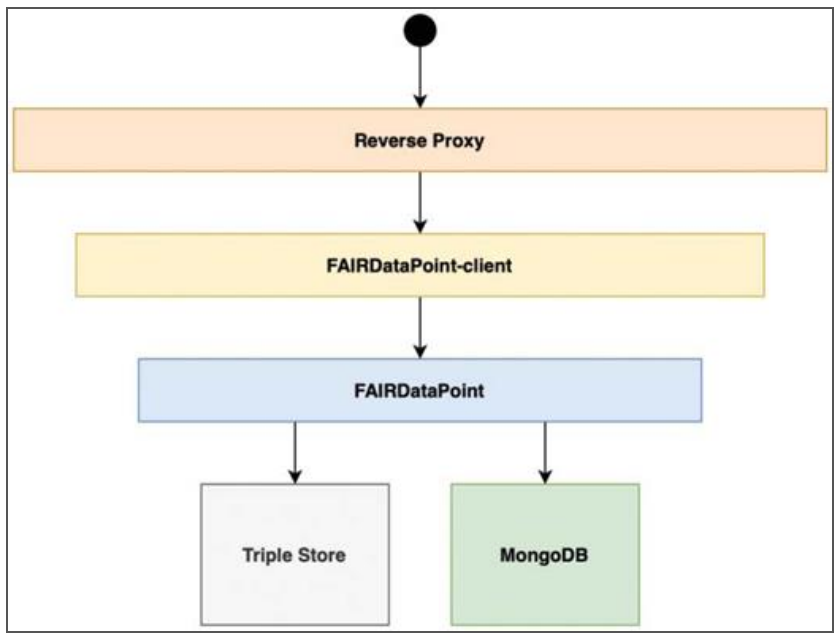
FAIR Data Point



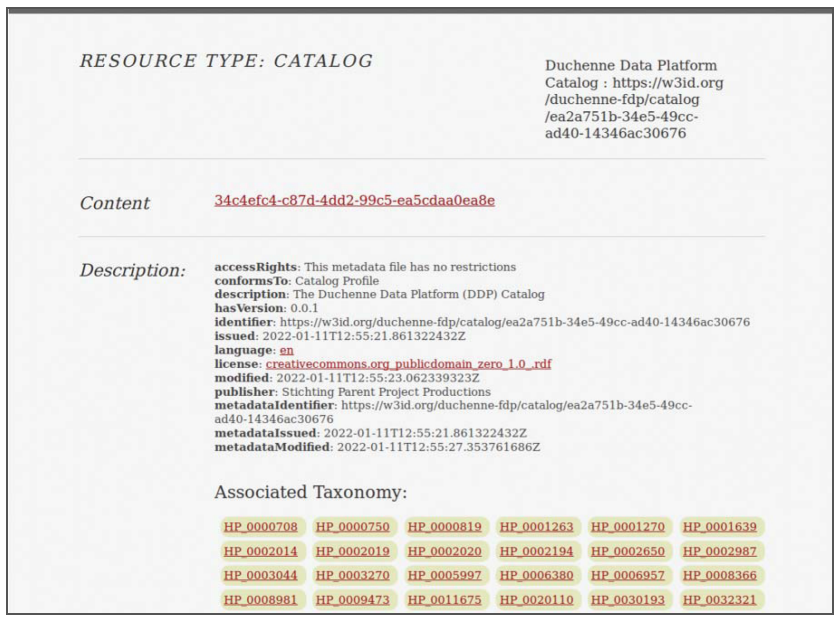
FAIR Data Point



FAIR Data Point



FAIR Data Point



RESOURCE TYPE: CATALOG

Duchenne Data Platform Catalog : https://w3id.org/duchenne-fdp/catalog/ea2a751b-34e5-49cc-ad40-14346ac30676

Content 34c4efc4-c87d-4dd2-99c5-ea5cdaa0ea8e

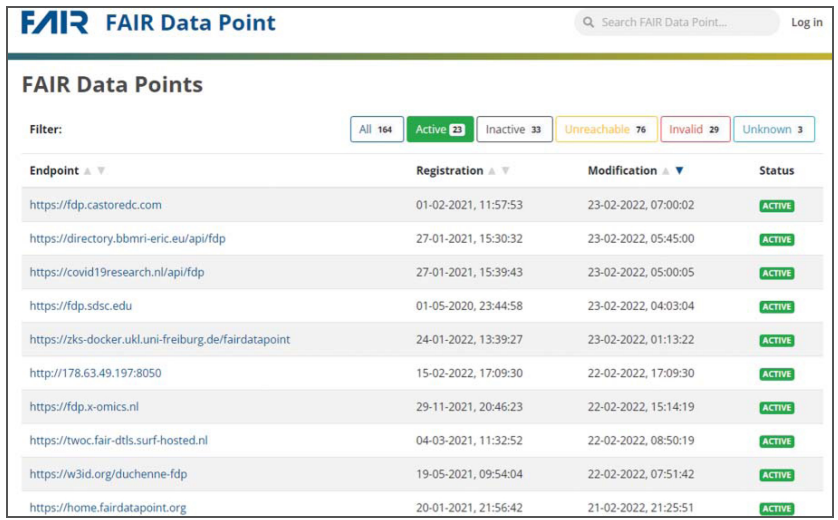
Description:

accessRights: This metadata file has no restrictions
conformsTo: Catalog Profile
description: The Duchenne Data Platform (DDP) Catalog
hasVersion: 0.0.1
identifier: https://w3id.org/duchenne-fdp/catalog/ea2a751b-34e5-49cc-ad40-14346ac30676
issued: 2022-01-11T12:55:21.861322432Z
language: en
license: creativecommons.org_publicdomain_zero_1.0_.rdf
modified: 2022-01-11T12:55:23.062339323Z
publisher: Stichting Parent Project Productions
metadataIdentifier: https://w3id.org/duchenne-fdp/catalog/ea2a751b-34e5-49cc-ad40-14346ac30676
metadataIssued: 2022-01-11T12:55:21.861322432Z
metadataModified: 2022-01-11T12:55:27.353761686Z

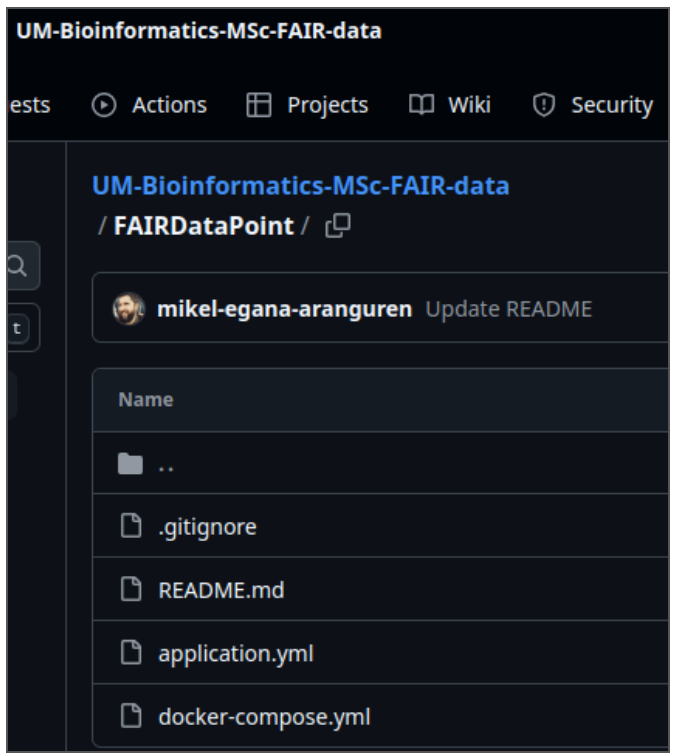
Associated Taxonomy:

HP_0000708	HP_0000750	HP_0000819	HP_0001263	HP_0001270	HP_0001639
HP_0002014	HP_0002019	HP_0002020	HP_0002194	HP_0002650	HP_0002987
HP_0003044	HP_0003270	HP_0005997	HP_0006380	HP_0006957	HP_0008366
HP_0008981	HP_0009473	HP_0011675	HP_0020110	HP_0030193	HP_0032321

FAIR Data Point



FAIR Data Point



FAIR Data Point

```yaml
version: '3'
services:
  fdp:
    image: fairdata/fairdatapoint:1.16.2
    volumes:
      - ./application.yml:/fdp/application.yml:ro
      - ./fdp-store:/tmp/fdp-store
  fdp-client:
    image: fairdata/fairdatapoint-client:1.16.2
    ports:
      - 81:80
    environment:
      - FDP_HOST=fdp
  mongo:
    image: mongo:4.0.12
    ports:
      - 27017:27017
    volumes:
      - ./mongo/data:/data/db
```

FAIR Data Point

```
repository:
  type: 2
  native:
    dir: /tmp/fdp-store
instance:
  clientUrl: http://localhost:81
```

Linked Data

Publishing FAIR Data: An Exemplar Methodology Utilizing PHI-Base

Principios Linked Data

1. Usar URIs (Uniform Resource Identifier) para identificar entidades
2. Usar URIs que son accesibles mediante el protocolo HTTP(S), para que usuarios o agentes automáticos puedan acceder a las entidades
3. Cuando se acceda a la entidad, proveer datos sobre la entidad en formatos estándar y abiertos, como RDF (Resource Description Framework)
4. Añadir en los datos que publicamos en RDF enlaces a las URIs de otras entidades, de modo que un usuario o agente pueda navegar por la red de datos y descubrir más datos que también siguen los principios Linked Data

Linked Data: "Base de datos universal"

Utilizar maquinaria Web (URIs HTTP), para identificar y localizar entidades

Utilizar un modelo de datos común, tripleta RDF, para integrar datos en los que aparecen esa entidades

base de datos universal

Ventajas Linked Data

Descubrimiento e integración de datos

Programación de agentes que consuman los datos

Actualización de datos mediante enlaces

Consultas complejas

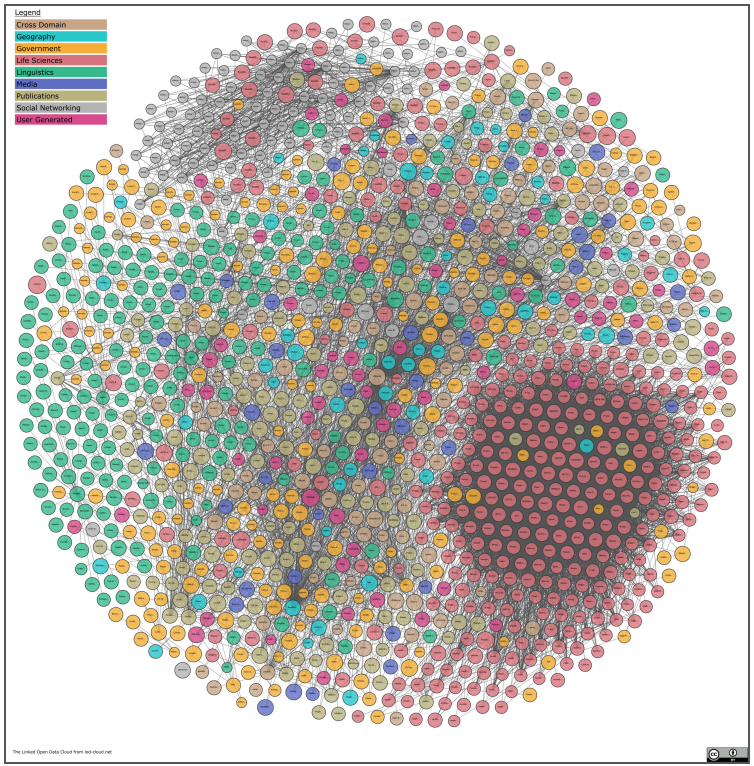
Ventajas Linked Data

Con Linked Data cualquiera puede publicar datos y enlazarlos a otros datos

El conjunto de datos abiertos publicados mediante Linked Data forma la «nube Linked Open Data»

Cada vez más instituciones públicas de todo el mundo usan Linked Data para publicar sus datos

Linked Open Data cloud



Linked Data: negociación de contenido

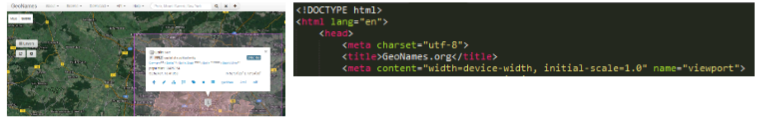
```
curl -L -H "Accept: text/html" "http://dbpedia.org/resource/Berlin"
```

```
curl -L -H "Accept: application/rdf+xml" "http://dbpedia.org/resource/Berlin"
```

```
<owl:sameAs rdf:resource="http://eu.dbpedia.org/resource/Berlin" />
<owl:sameAs rdf:resource="http://linkedgeodata.org/triplify/node240109189" />
<owl:sameAs rdf:resource="http://sws.geonames.org/2950159/" />
```

↓

```
curl -L -H "Accept: text/html" "http://sws.geonames.org/2950159/"
```



```
<!DOCTYPE html>
<html lang="en">
  <head>
    <meta charset="utf-8">
    <title>GeoNames.org</title>
    <meta content="width=device-width, initial-scale=1.0" name="viewport">
```

```
curl -L -H "Accept: application/rdf+xml" "http://sws.geonames.org/2950159/"
```

```
<gn:countryCode>DE</gn:countryCode>
<gn:population>3426354</gn:population>
<wgs84_pos:lat>52.52437</wgs84_pos:lat>
<wgs84_pos:long>13.41053</wgs84_pos:long>
<wgs84_pos:alt>74</wgs84_pos:alt>
<gn:parentFeature rdf:resource="http://sws.geonames.org/6547539/"/>
<gn:parentCountry rdf:resource="http://sws.geonames.org/2921044/"/>
<gn:parentADM1 rdf:resource="http://sws.geonames.org/2950157/"/>
<gn:parentADM3 rdf:resource="http://sws.geonames.org/6547383/"/>
<gn:parentADM4 rdf:resource="http://sws.geonames.org/6547539/"/>
<gn:nearbyFeatures rdf:resource="http://sws.geonames.org/2950159/nearby.rdf"/>
```

Linked Data: negociación de contenido

curl -L -H "Accept: text/html" "http://dbpedia.org/resource/Berlin"

curl -L -H "Accept: application/rdf+xml" "http://dbpedia.org/resource/Berlin"

curl -L -H "Accept: text/html" "http://sws.geonames.org/2950159/"

curl -L -H "Accept: application/rdf+xml" "http://sws.geonames.org/2950159/"

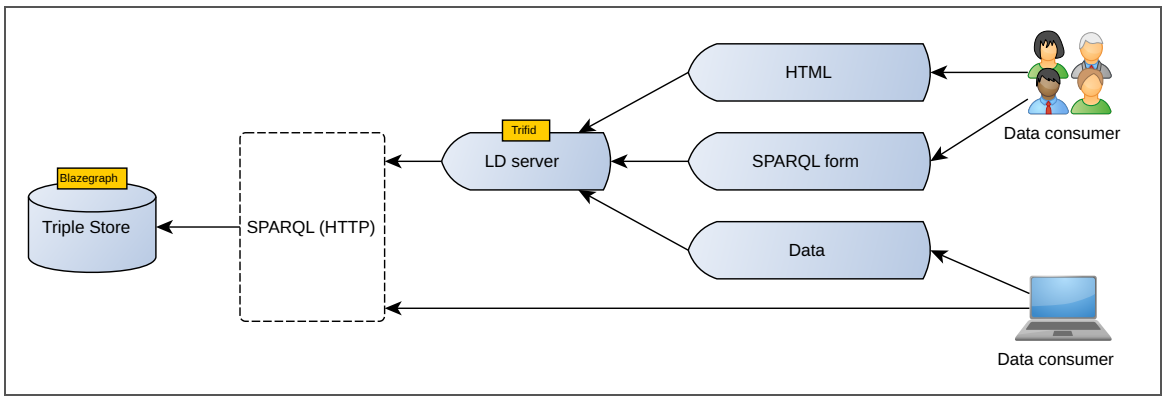
URIs/URLs en Linked Data

URI identifica a entidad; URLs localizan diferentes representaciones (RDF, HTML, ...) de la entidad

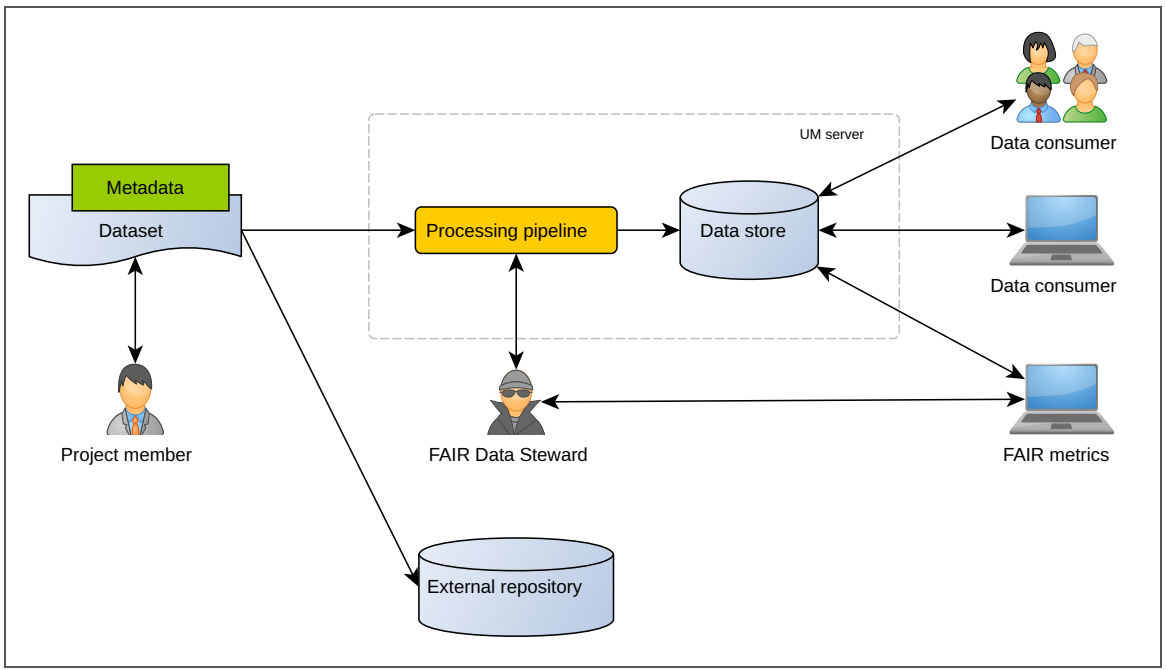
Descripción de la entidad (RDF, HTML, ...) ≠ entidad

HTTP URI dereferenciable: cuando se busca una URI, debería devolver una descripción adecuada del objeto que identifica esa URI

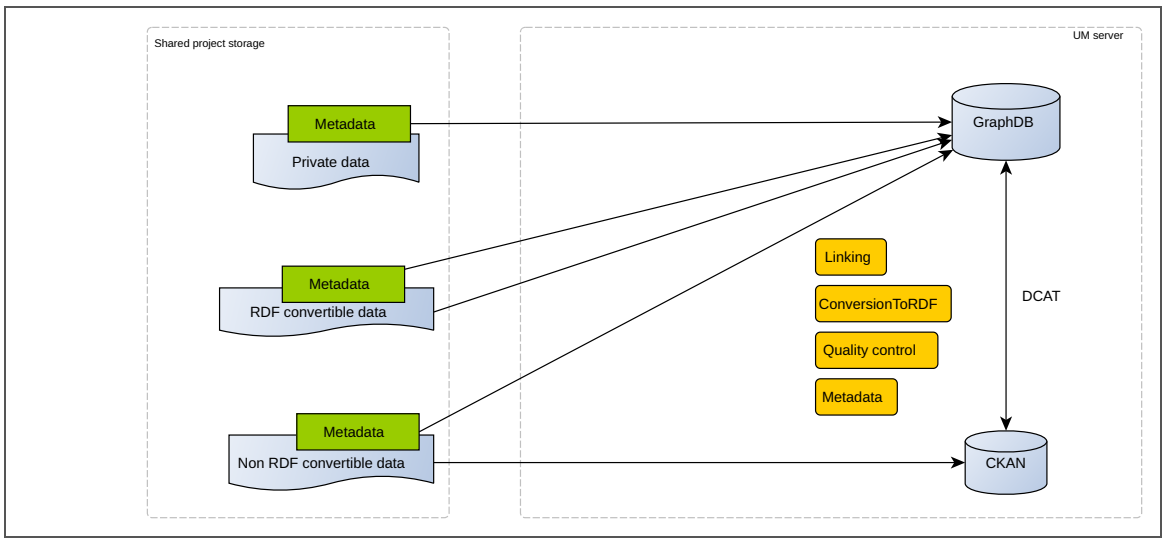
Publicar datos en Linked Data



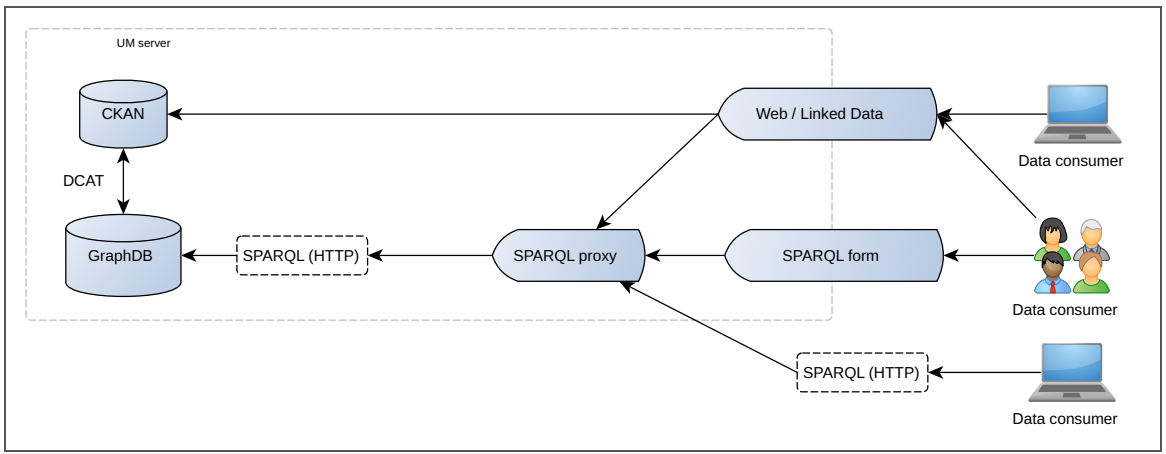
Publicar datos en Linked Data: SUPPORT4LHS



Publicar datos en Linked Data: SUPPORT4LHS



Publicar datos en Linked Data: SUPPORT4LHS



Ejemplo práctico

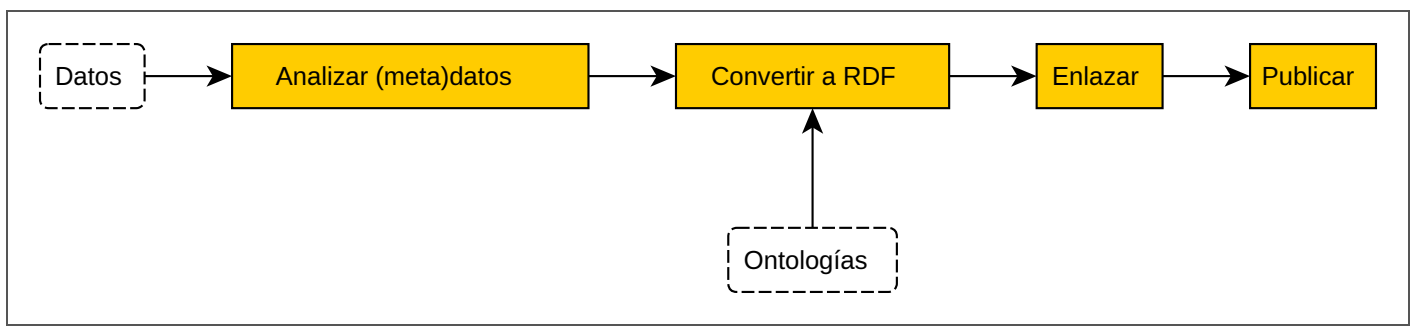
"FAIRificar" un dataset de ejemplo

Proceso vertical: intentar cubrir todos los pasos técnicos, sin entrar en detalles de contenidos

Ejemplos muy simples, nada realistas

A Generic Workflow for the Data FAIRification Process

566-AnnikaJacobsen-18.pdf



Datos de origen

GenesUM.csv (LinkedDataServer/data/)

Datos en RDF

GenesUM.nt (LinkedDataServer/data/)

GenesUM.nq (LinkedDataServer/data/)

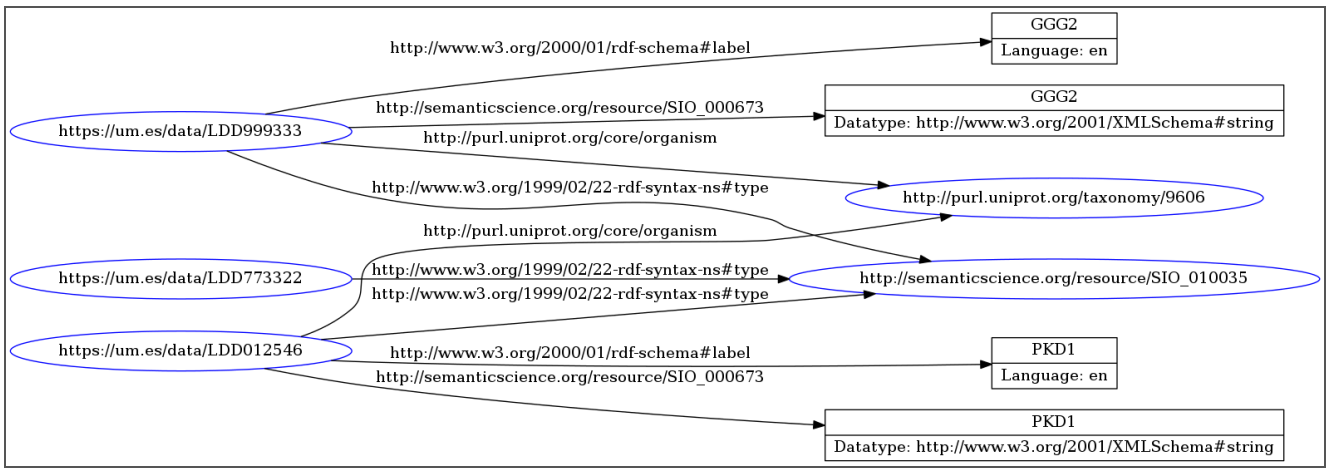
Conversión a RDF

CSV2RDF.py

Se basa en RDFLib

Otras herramientas posibles: YARRRML (Google Enterprise Knowledge Graph Entity Reconciliation Service),TARQL, OntoRefine, Open Refine, Eccenca CMEM, Apache Any23, etc.

Conversión a RDF



RDF Grapher

Anotar con ontologías

Semantic Science Integrated Ontology (SIO) (SIO_010035)

Uniprot Core Ontology (9606)

Enlazar

A otras URIs

Manualmente, o con herramientas como SILK

Metadatos

Asignar una URI a nuestro dataset (F1):

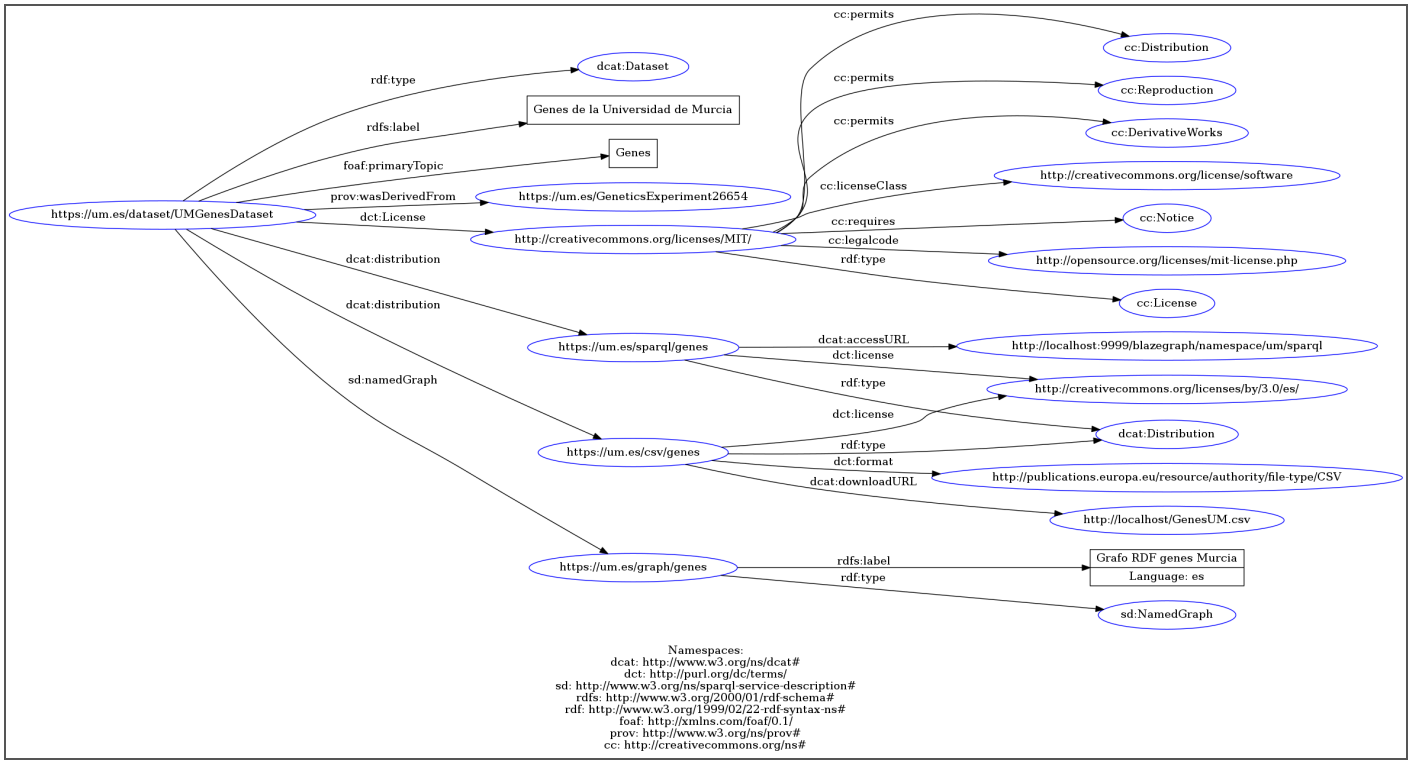
https://um.es/dataset/UMGenesDataset

Usar diferentes vocabularios como DCAT, VOID, PROV, FOAF, etc. para añadir metadatos

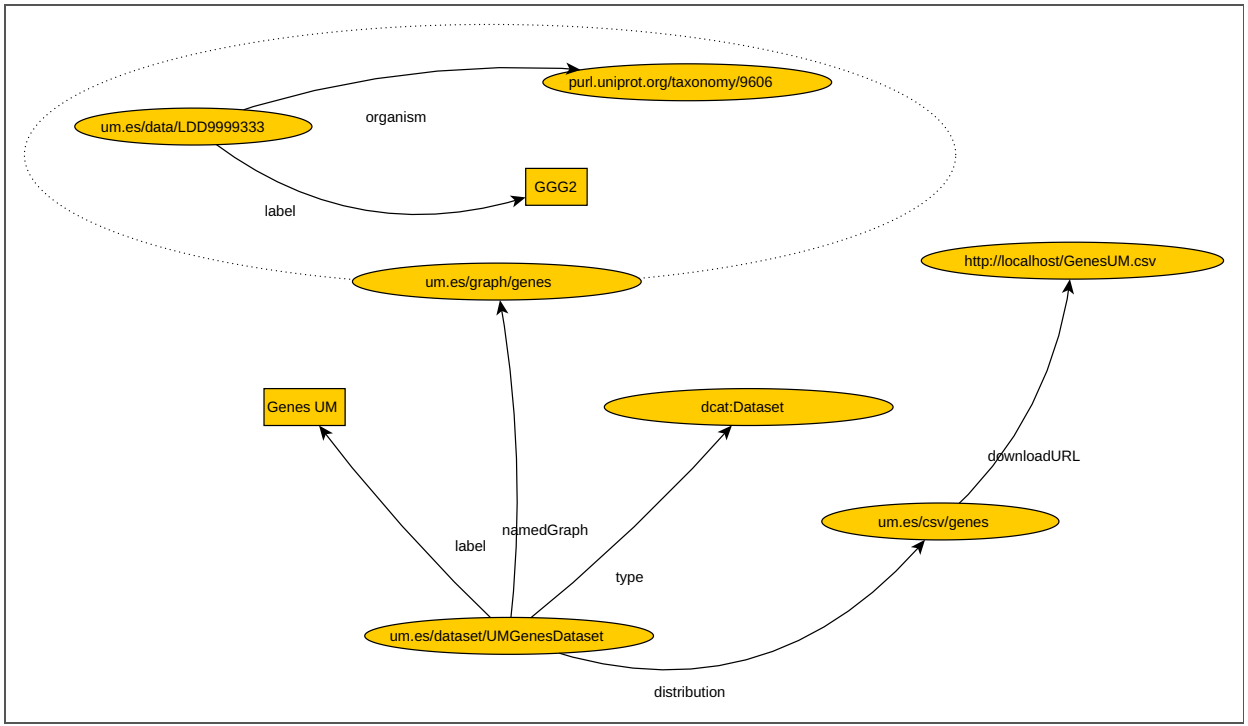
Named Graph: conjunto de triples que se identifica con una URI (RDF W3C)

MetadataGenes.ttl (LinkedDataServer/data/)

Metadatos


https://um.es/dataset/UMGenesDataset
rdf:type
dcat:Dataset
rdfs:label
Genes de la Universidad de Murcia
foaf:primaryTopic
Genes
prov:wasDerivedFrom
https://um.es/GeneticsExperiment26654
dct:License
http://creativecommons.org/licenses/MIT/
dcat:distribution
https://um.es/sparql/genes
dcat:distribution
https://um.es/csv/genes
sd:namedGraph
https://um.es/graph/genes
cc:permits
cc:Distribution
cc:permits
cc:Reproduction
cc:permits
cc:DerivativeWorks
cc:licenseClass
http://creativecommons.org/license/software
cc:requires
cc:Notice
cc:legalcode
http://opensource.org/licenses/mit-license.php
rdf:type
cc:License
dcat:accessURL
http://localhost:9999/blazegraph/namespace/um/sparql
dct:license
http://creativecommons.org/licenses/by/3.0/es/
rdf:type
dcat:Distribution
dct:license
http://creativecommons.org/licenses/by/3.0/es/
rdf:type
dcat:Distribution
dct:format
http://publications.europa.eu/resource/authority/file-type/CSV
dcat:downloadURL
http://localhost/GenesUM.csv
rdfs:label
Grafo RDF genes Murcia
Language: es
rdf:type
sd:NamedGraph
Namespaces:
dcat: http://www.w3.org/ns/dcat#
dct: http://purl.org/dc/terms/
sd: http://www.w3.org/ns/sparql-service-description#
rdfs: http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#
rdf: http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#
foaf: http://xmlns.com/foaf/0.1/
prov: http://www.w3.org/ns/prov#
cc: http://creativecommons.org/ns#

Datos/Metadatos



Datos/Metadatos

Datos: CSV (GenesUM.csv), RDF (GenesUM.nq)

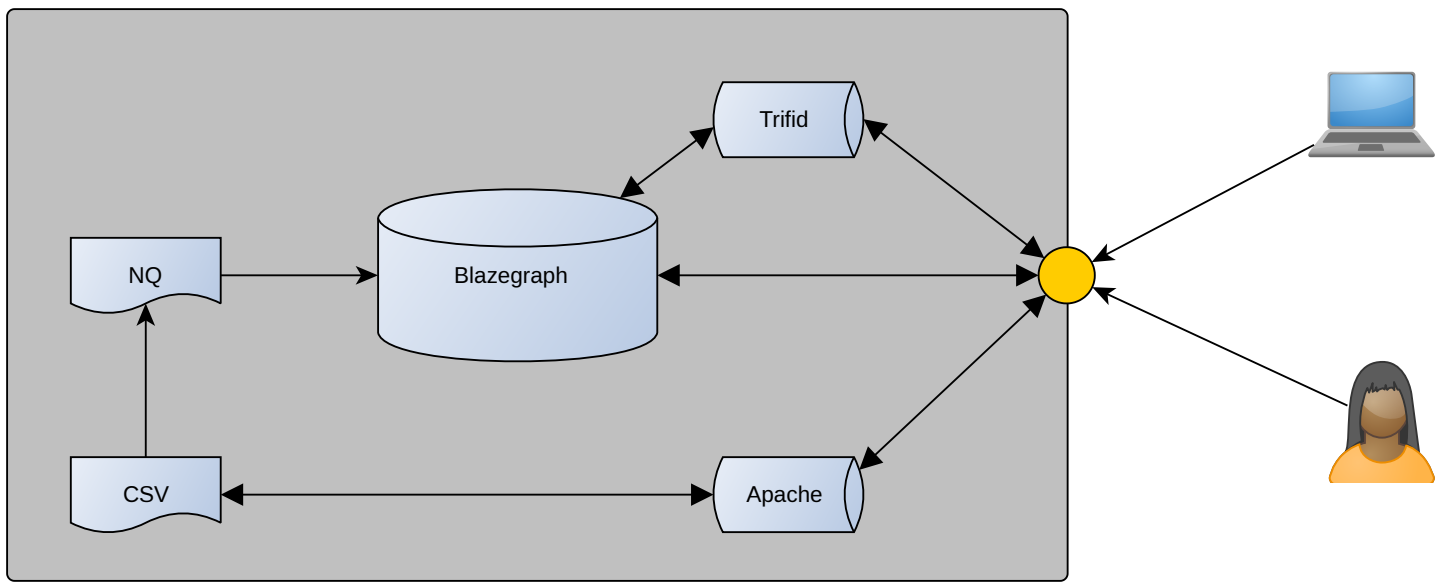
Metadatos: RDF (MetadataGenes.ttl)

Publicación

Datos: CSV (Apache), RDF (Blazegraph/Trifid)

Metadatos: RDF (Blazegraph/Trifid)

Publicación



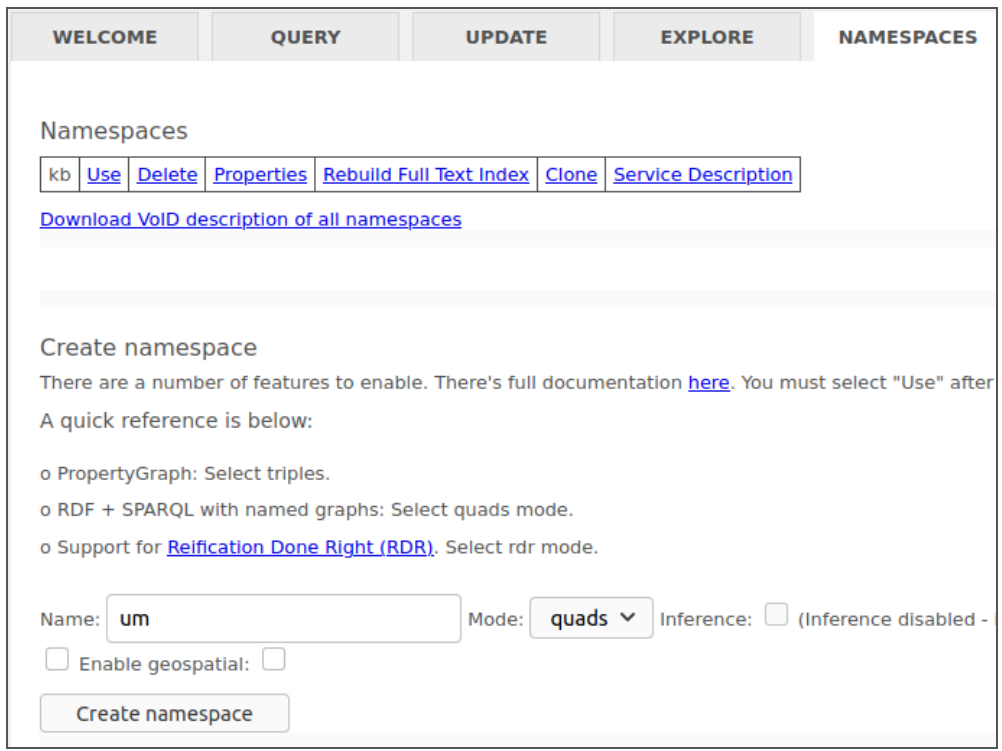
Blazegraph, Trifid

LinkedDataServer/TrifidBlazegraph: $ docker-compose up -d

```yaml
version: "3"
services:
   linked_data_server:
      image: ghcr.io/zazuko/trifid
      ports:
         - "8080:8080"
      environment:
         SPARQL_ENDPOINT_URL: "http://sparql_endpoint:9999/blazegraph/namespace/um/sparql"
         #DATASET_BASE_URL: "https://um.es/data/"
         DATASET_BASE_URL: "http://fair/data/"

   sparql_endpoint:
      image: blazegraph
      ports:
         - "9999:9999"
```

Blazegraph


WELCOME
QUERY
UPDATE
EXPLORE
NAMESPACES
Namespaces
kb
Use
Delete
Properties
Rebuild Full Text Index
Clone
Service Description
Download VoID description of all namespaces
Create namespace
There are a number of features to enable. There's full documentation here. You must select "Use" after
A quick reference is below:
o PropertyGraph: Select triples.
o RDF + SPARQL with named graphs: Select quads mode.
o Support for Reification Done Right (RDR). Select rdr mode.
Name:
um
Mode:
quads
Inference:
(Inference disabled -
Enable geospatial:
Create namespace

Trifid

Configurar Trifid para que haga consultas contra SPARQL endpoint de Blazegraph (Servicio sparql_endpoint):

http://sparql_endpoint:9999/blazegraph/namespace/um/sparql

SPARQL Service Description

SPARQL Protocol

Trifid

URIs:

- https://um.es/data/
- http://IP:8080

Apache

/var/www/html/

Resumen

¿Hemos conseguido implementar todos los principios FAIR?

¿En qué medida?

Proyecto a realizar

Reproducir en el servidor Google Cloud este proceso (Con documentación extra)

Incluir en Entregable de Explotación semántica de datos (Publicación de datos)