

Ontología de minerales: aplicación en el ámbito ambiental a los silicatos

A. Galan Saulnier⁽¹⁾ y R. García Giménez⁽²⁾

(1) Departamento de Arquitectura y Tecnología de Sistemas Informáticos. Facultad de Informática. Universidad Politécnica de Madrid. Campus de Montegancedo, Boadilla del Monte, 28660 Madrid.

agalan@fi.upm.es y almudena.galan@upm.es

(2) Departamento de Geología y Geoquímica. Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma de Madrid. Campus de Cantoblanco.

Ctra. Colmenar Viejo, Km 15, 28049 Madrid

rosario.garcia@uam.es

RESUMEN

El presente trabajo pretende dar a conocer la aplicación de una ontología o herramienta informática de gran actualidad, desarrollada dentro del campo de la inteligencia artificial y en concreto del de la ingeniería del conocimiento, a unos elementos inertes, la clase de los silicatos, que son minerales de interés científico, técnico y económico. La importancia de aplicar la ontología a los minerales se debe a que éstos son un ejemplo de las sustancias que podrían generar impactos ambientales de carácter negativo sobre otras variables ambientales del medio físico como la atmósfera, la hidrosfera, etc. y posibles efectos posteriores sobre la salud humana.

Palabras clave: aplicación, clase silicatos, mineral, ontología, silicatos

Minerals ontology: application in the environmental field to silicates

ABSTRACT

The aim of this paper is to describe the application of an ontology, or up-to-date computerized tool, developed in the field of artificial intelligence and in particular of knowledge engineering, to inert elements, in this case the silicate class, which are minerals of scientific, technical and economic interest. The importance of applying ontology to minerals lies in the fact that these substances are capable of causing negative environmental impacts upon other variables in the natural environment, such as the atmosphere and the hydrosphere, and possible subsequent effects on human health.

Key words: application, mineral, ontology, silicate, silicate class

Introducción

El descubrimiento de una técnica sólo es interesante si permite resolver y/o ayudar a la resolución de problemas. No obstante, en el caso de aceptar esta premisa sólo se asumirá como una ayuda en la acción del pensamiento. Para Rich (1987), la inteligencia artificial es el dominio que estudia la forma en que la máquina debe realizar las tareas, que, hasta el día de hoy, eran exclusivas del hombre. Vogel (1988) sugiere que la inteligencia artificial está expuesta a los mismos modelos de representación y tratamiento que los empleados por los sentidos.

Un grupo de científicos de la Universidad de Stanford, Escuela de Ingeniería, California (USA), en los años sesenta del siglo pasado, propusieron la manera de estructurar una elevada cantidad del conocimiento así como su engranaje en el campo de la

informática, separando el conocimiento y el razonamiento de la ordenación.

En el campo de la inteligencia artificial los sistemas expertos resultan ser bastantes conocidos, siendo capaces de reproducir el razonamiento que sigue un experto, cuyo trabajo consiste en analizar un número seguro de hechos o datos para emitir un veredicto. Además, el sistema experto se concibe como un elemento capaz de ser manejado por una persona que no entiende del tema. Recordemos que un Sistema Experto puede ser comprendido con facilidad como aquel sistema computarizado capaz de emular el comportamiento de un experto para el caso de un dominio concreto, tal como se extrae de la definición aportada en la dirección electrónica http://es.wikipedia.org/wiki/Sistema_experto.

Las ventajas de un sistema experto se corresponden con el hecho de profundizar en el conocimiento

del medio y establecer una base de datos segura. Para estructurarlo de manera lógica y organizar la construcción de un modelo de simulación es el método idóneo, impidiendo las consecuencias de acciones previas e incluso, permitiendo un avance de los resultados.

Las Ontologías, menos conocidas que los sistemas expertos, pero también estudiadas dentro de la Inteligencia Artificial (IA), permiten unificar el vocabulario.

Tras el desarrollo de las Ontologías éstas quedaban almacenadas, anteriormente, en repositorios como el de la Universidad de Stanford en el cual se almacenan diferentes ontologías visibles a través de los servidores americano y español de las direcciones web Server <http://www-ksl-svc.stanford.edu> y <http://www-ksl-svc-lia.dia.fi.upm.es:5915>, respectivamente, así como en los actuales repositorios enfocados a la Web semántica tales como Swoogle y Watson.

El concepto de ontología, que se encuentra descrito incluso en la enciclopedia libre Wikipedia <http://es.wikipedia.org/wiki/Ontolog%C3%ADa> y definido, a fecha de 9 de mayo de 2009, en la vigésimo segunda edición del Diccionario de la Real Academia Española (RAE) como "Parte de la metafísica que trata del ser en general y de sus propiedades trascendentales" (sic), subyace una interpretación filosófica, que incluye la naturaleza y la organización de la realidad, junto con otra interpretación desde el campo de la Ingeniería del Conocimiento que acepta terminología, relaciones, vocabulario, etc.

Desde que el filósofo alemán Christian Wolf (1679-1754) diera a conocer por primera vez el concepto de Ontología en la obra *Philosophia Prima sive ontologia metodo scientifica pretractata, qua omnes cognitionis humanae principia continentur*, publicada en 1730, se pueden obtener diferentes definiciones para el término "Ontología", una de ellas y con marcado carácter ambientalista es la mostrada por los autores Fausto O. Sarmiento, Fernando Vera y Jose Juncosa (Sarmiento, 2000) quienes indican que el biólogo y filósofo alemán Ernst Heinrich Philipp August Haeckel (1834-1919), autor en Alemania de la obra de Charles Darwin (1809-1822) y creador de los términos Phylum, Ecología y Ontología " para referirse al estudio de las formas de un individuo considerado no solamente en el curso de su desarrollo sino también en su estado adulto "(sic página 149).

Algunas de estas definiciones de sesgo filosófico desde el punto de vista de la Inteligencia Artificial (IA), y no con un aspecto biológico como el descrito anteriormente, han sido recopiladas por J. T. Fernández Breis en su Tesis Doctoral "Un entorno de integración de Ontologías para el desarrollo de sistemas de Gestión de Conocimiento" presentado en el

departamento de Ingeniería de la Información y las Comunicaciones de la Universidad de Murcia. De dichas definiciones y desde el enfoque del presente trabajo, se deben destacar aquellas que han sido aportadas por Neches *et al.* (1991), Gruber (1993), y Swartout *et al.* (1997) y la de Pim Borsts Hans Akkermens (1997), todas ellas recopiladas por Silvia Arano en su artículo "Los Tesoros y las Ontologías en la Biblioteconomía y la Documentación "(Arano, 2005), tal como se reproducen manteniendo el orden cronológico de las mismas:

- *an ontology defines the basic terms and relations comprising the vocabulary of a topic area as well as the rules for combining terms and relations to define extensions to the vocabulary* (Neches *et al.* 1991)
- *an ontology is an explicit specification of a conceptualization* (Gruber, 1993).
- *a set of structured terms that describes some domain or topic. The idea is that ontology provides a skeletal structure for a knowledge base* (Swartout *et al.* 1996).

Sin embargo esto no implica que las mencionadas definiciones permitan asemejar el concepto de Ontología al de "conceptualización", término que al contrario del de ontología, no aparece descrito en el de la edición del Diccionario de la Lengua Española de la Real Academia Española (RAE), pero que sí está recogida por Pim Borst (1997) bajo la definición "Ontologies are defined as a formal specification of shared conceptualization" (Una ontología es una especificación formal y explícita de una conceptualización compartida).

Definiciones recopiladas en la publicación de A. Gomez Perez y colaboradores en el año 2004, en las que además se encuentran otras definiciones como la aportada por N. Guarino o bien por A. Benaras y colaboradores en el año 1996 en la que muestra la relación entre Ontología y Base de Conocimiento. Concepto este último tomado de http://es.wikipedia.org/wiki/Base_de_conocimiento (3 de junio de 2010) de donde se extrae que se corresponde con un tipo o clase de Base de Datos (BD) para la gestión del conocimiento y de ahí que sea capaz de almacenar, organizar y recuperar los conocimientos de una manera computarizada.

La existencia de este concepto, no solo se refiere a la fecha de aparición de ambos, siendo las Base de Datos (BD) ó Data Base (DB) anteriores a las Bases de Conocimiento (BC) ó Knowledge Base (KB), sino también por el hecho de que las BD solo disponen de capacidad para almacenar y gestionar gran volumen de datos mientras que las BC además, presentan capacidad para almacenar reglas relativas a los datos

recopilados, de forma que permiten obtener otra serie de informaciones en modelos de esquemas, tablas, etc.

En relación a la construcción de una Ontología, y sin considerar el tipo de la ontología, se sabe que éstas se encuentran formadas por Clases, Relaciones, Funciones, Ejemplos y Axiomas, con aplicación desde campos diferentes del conocimiento o ciencias, datos todos ellos aportados por investigadores y/o docentes en cada una de las materias a tratar, como ejemplo la ontología denominada *Chemicals: Una Ontología de Elementos Químicos* realizada por M. Fernández López como proyecto Fin de Carrera en la Facultad de Informática perteneciente a la Universidad Politécnica de Madrid (Fernández, 1996), así como la realizada por la alumna Paloma Pinilla Ponz (Pinilla, 1999) en su trabajo Fin de Carrera de la licenciatura en Ciencias Ambientales en la Universidad Autónoma de Madrid sobre el conjunto de minerales silicatados, base del presente trabajo y contando en todo momento con el apoyo en el campo de la mineralogía con R. García Giménez y en el de Informática, con A. Gómez y con el laboratorio dirigido por esta última.

Para iniciar la presente ontología sobre elementos inertes de la Naturaleza, se precisaba de una clasificación mineralógica, debiendo conocer para ello cual de las existentes era la idónea y sobre todo, llevar a cabo un breve discurrir histórico de las clasificaciones de minerales. Se sabe que el peripatético Teofrasto (372-287 a.C.), discípulo de Aristóteles (384-322 a.C.), fue quien llevo a cabo la primera sistematización cualitativa de los minerales. Basada en ella y ya en el siglo XVIII se menciona la primera clasificación de los mismos según la composición química, efectuada por el químico y mineralogista sueco Axel Cronstedt (1722-1765). Esta clasificación se mantuvo hasta que, en el siglo XIX, el geólogo, mineralogista y zoólogo estadounidense James Dwight Dana (1813-1895) indicó en su obra "A System of mineralogy", publicada en 1837, que la estructura previa de las clases minerales no satisfacía completamente la sistematización de los minerales. De esta forma Dana añadió a sus descripciones la consideración de la composición interna. No obstante y a pesar de la puntualización, aportada por J.D. Dana, se sigue considerando tradicionalmente como la clasificación más aceptada aquella que tiene en cuenta la composición química de los minerales.

Asumiendo que la clasificación mineralógica se hará según la composición química, ésta se basa en los dos grandes y a menudo complejos constituyentes de la composición química de los minerales (grupo aniónico y grupo catiónico), siendo el primero

(ión negativo) el que condiciona las diferentes clases, y el grupo segundo (ión positivo) el que da lugar a la ordenación por familias. Además, los minerales con el mismo anión suelen manifestarse en la naturaleza unidos formando asociaciones paragenéticas (minerales asociados en función de su proceso de cristalización), o incluidas en un mismo yacimiento o depósito. Para terminar, se debe agregar que esta clasificación, desde un punto de vista químico, coincide con la clasificación y con la marcha analítica (análisis consecutivo de identificación de grupos químicos en el laboratorio).

No obstante, y según lo visto hasta el momento, el empleo de un criterio químico necesita una buena clasificación de los minerales lo que no resultó totalmente satisfactorio, ya que la caracterización de un mineral debe vincularse a la identificación de su estructura interna. Esta característica se agregó a la clasificación previa, junto con la composición química y cuyos proyectos pioneros, en este campo, fueron impulsados por el inglés William Lawrence Bragg (1890-1971) premio Nobel de Física y por el alemán Víctor Moritz Goldschmidt (1888-1947), premio Fridtjof Nansen, usando como modelo la clasificación de los silicatos, compuestos de silicio (Si), oxígeno (O) y uno o más metales [sodio (Na), calcio (Ca), etc.] y cuya abundancia llega al 90% de los minerales del Planeta Tierra. Posteriormente se han agregado a esta clasificación otros criterios complementarios, como los aportados por Palache, C. y colaboradores, en 1944, y por el mineralógico alemán Karl Hugo Strunz, H., en 1970, así como algunos ajustes realizados posteriormente sobre todo por organismos internacionales como la International Mineralogical Association (IMA) o Asociación Internacional Mineralógica.

Desarrollo del tema

La estructura de una Ontología se desarrolla en el empleo de una base de conocimiento, descrita anteriormente, y que se encuentra constituida por hechos, clases, mandatos, objetos, bases de datos y una inferencia motora destinada a considerar la estructura del conocimiento para aplicar las reglas a los hechos.

Se genera una ontología de minerales, en este caso, que se corresponde con un campo de gran alcance, donde se ha hecho incidir un número elevado de variables sobre el mismo mineral. Se corresponde con variadas propiedades que originan campos múltiples del saber, consideradas desde diversas disciplinas, y que se encuentran encaminadas a la identificación de los minerales.

En Mineralogía, el uso de un sistema experto para desarrollar unas necesidades de aplicación precisa de interpretación, simulación y planificación. Es por ello que se debe ahondar en el conocimiento del estudio, de la estructura del saber y de seleccionar una persona capaz de establecer un diagnóstico y una acción subsiguiente. En resumen, puede decirse, que el fin primario del sistema se corresponde con la estructuración del conocimiento, la simulación y el entrenamiento de un experto.

En primer lugar, al considerar lo esencial en el campo de estudio, se debe decidir sobre la clasificación mineral empleada. Para esto se consultaron diferentes manuales de mineralogía, al objeto de evaluar sus clasificaciones y decidir lo que era adecuado, con el asesoramiento de un experto en las materias de química y mineralogía.

Se han considerado las once clases minerales que se indican en la Tabla 1, cada una de ellas según los grupos aniónicos. Estas se subdividen en familias, y a su vez, se dividen en grupos con semejanzas cristalográficas. Los grupos se encuentran formados por tipos, capaces de generar series, con estructuras similares, pero con composiciones químicas diferentes. Para terminar, los tipos se pueden subdividir en variedades químicas, modificando atributos que reflejan la presencia de cantidades no usuales de elementos químicos.

Materiales y Métodos

La estructura de la Ontología tiene su soporte en la utilización de una base de conocimiento, constituida por hechos, clases, mandatos, objetos, bases de

datos y una inferencia motora destinada a considerar la estructura del conocimiento para aplicar las reglas a los hechos.

En el presente trabajo se construye una ontología de minerales que se corresponde con un campo de gran alcance, en que se ha hecho incidir un número alto de variables sobre el mismo mineral. Se corresponde con propiedades diferentes que originan campos múltiples del saber, generado desde disciplinas diferentes dirigidas a la identificación mineral.

Qué es lo primario en el campo de estudio considerado ha sido la decisión sobre la clasificación mineral que se debe emplear. Para esto se han consultado diversos manuales de mineralogía, al objeto de evaluar sus clasificaciones y decidir los más adecuados, no obstante la última palabra la tiene un entendido en la materia.

Del gran número de minerales enumerados por Pinilla (1999) sólo se considera la clase de los minerales silicatados dada la gran cantidad de variedades existentes en la Naturaleza que, a su vez, son utilizados en diferentes aspectos industriales para la fabricación de diversos elementos, como corresponde al caso del Silicato de sodio (SiO_3Na_2) utilizado en las industrias papeleras, textiles, fabricación de jabones, fabricación de adhesivos, etc. Industrias que en algún momento y en mayor o menor grado pueden producir o producen elementos contaminantes y que a corto o a largo plazo son eliminados al Medio Físico en alguna de sus variables (agua, suelo, aire, etc.), donde pueden generar un impacto negativo sobre el Medio ambiente, aunque este impacto sea minimizado; ejemplo de ello pudiera ser una contaminación del suelo debida a un vertido que daría unas contaminaciones concatenadas (vegetación, etc.) y por

Clase	Ejemplo de mineral	Composición química
Elementos nativos	Oro	Au
Sulfuros	Esfalerita	ZnS
Óxidos	Pirolusita	MnO_2
Hidróxidos	Brucita	$\text{Mg}(\text{OH})_2$
Haluros	Carnalita	KCl
Carbonatos	Magnesita	MgCO_3
Boratos	Ulexita	$\text{NaCaB}_5\text{O}_{13}(\text{OH})_6 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
Sulfatos y Cromátos	Anglesita	PbSO_4
Tungstatos y Molibdatos	Scheelita	CaWO_4
Fosfatos, Arseniatos y Vanadatos	Eritrina	$\text{CO}_3(\text{AsO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
Silicatos	Cuarzo	SiO_2

Tabla 1. Clasificación mineral
Table 1. Classification of minerals

consiguiente la generación de un problema medio ambiental.

Pero de todos es sabido que algunos minerales también son capaces de producir una cierta toxicidad, concepto diferente al de la contaminación, que para algunos casos pueden llegar a ser considerados como factores de riesgo para la salud del ser humano, sobre todo dentro del campo de la industria.

Sin embargo, este aspecto indicado de una forma tan generalista, debe llevar unido el concepto de la dosis y el de la dosis-efecto ó dosis-respuesta, aspectos ambos propios de la toxicología en cualquiera de sus vertientes, ambiental, industrial, etc. Recordemos que el concepto de dosis aparece en el siglo XVI y se debe al alquimista, médico y astrólogo suizo Teofrasto Paracelso o Teofrasto von Hohenheim (Zurich 1493–Salzburgo 1541) quien fue el primero en indicar que ciertos venenos usados en dosis adecuadas podían presentar una capacidad de curación, punto de vista que daba a la idea de dosis un aspecto cuantitativo, haciendo uso de determinadas especies vegetales [alcanfor o "*Cinnamomum camphora*" (L.), etc.] y de algunos minerales productores de metales, por ejemplo Arsénico (As), Plomo (Pb), etc.

Referente al término de dosis existen algunas frases relevantes dentro del campo de la toxicología, por ejemplo la frase << *Dosis sola facit venenum* >> (*solamente la dosis determina que una cosa sea o no sea veneno*), aportada por T. Paracelso en su Trilogía; o bien la aportada por el inglés Peter M. Latham (1789-1875) << *Medicamentos y venenos son a veces las mismas sustancias administradas con diferente intencion* >>, frases extraídas de forma textual de la obra de M. Repeto (1997).

Además, dentro del campo de la Toxicología deben ser considerados otros aspectos o conceptos, entre los que se deben destacar los de Toxicidad, Solubilidad y Estado (recordemos que las sustancias en estado de polvo disponen de mayor solubilidad) que presentan las especies químicas constituyentes de los minerales. A modo de ejemplo se indican algunos de los minerales con carácter más o menos peligroso: Greenockita (CdS), Serpentina ($\text{Mg}_6[(\text{OH})_8\text{Si}_4\text{O}_{10}]$), Whiterita (BaCO_3), entre otros.

Desde el punto de vista de la Toxicología ambiental, John H. Duffus 1983 considera el polvo de asbesto ó Silicato de Magnesio, como una sustancia toxica atmosférica. Se encuentra en forma de asbesto blanco [Crisotilo [$\text{Mg}_6[(\text{OH})_8\text{Si}_4\text{O}_{10}]$], Tremolita [$\text{Ca}_2\text{Mg}_5(\text{OHSi}_4\text{O}_{11})_2$]], y asbesto azul ó Crocidolita [variedad de la Riebeckita [$[\text{Na}_2\text{Fe}_4^{3+}(\text{OH Si}_4\text{O}_{11})_2$] de alta peligrosidad].

Este peligro de los minerales puede llegar a ser de carácter cancerígeno para el caso de algunos minera-

les de clase de los silicatos, presentándose esta peligrosidad en el paso a los pulmones de pequeñas fibras, aumentando el riesgo cuanto más pequeña sea el tamaño de la fibra. No hay que olvidar que los silicatos presentan un carácter industrial y por ello laboral, motivo por el cual deben ser tratados cuidadosamente por las industrias tanto desde el punto de vista del Medio ambiente como desde la Prevención de Riesgos Laborales (PRL).

La clase de silicatos está estructurada en función del grupo aniónico silicato (SiO_4)²⁻, siguiendo la clasificación de Corneliu Klein y Cornelius S. Hurlbut publicada en 1977, tal como se muestra en la Tabla 2.

Los minerales se definen según un número alto de parámetros (brillo, color, morfología, transparencia, etc.), que han sido todos usados para el desarrollo del Diccionario de conceptos de esta Ontología de minerales, y que, a modo de ejemplo, se presenta en la Tabla 3 en el concepto de Atributos de Clase (cabecera de la tabla) para el caso del mineral Egirina ó Actima [$\text{NaFe}(\text{SiO}_2\text{O}_6)$].

En la Tabla 4 se muestra un ejemplo de mineral de cada una de las clases de silicatos con sus unidades aniónicas mínimas.

P. Pinilla, disponiendo de los conocimientos suficientes sobre medio ambiente así como de la visión multidisciplinar que caracteriza a la temática medioambiental entre la que se encuentra la mineralogía, indica en su trabajo que, para el desarrollo de la Ontología de Minerales, se precisa un conocimiento adecuado en la materia (en este supuesto los minerales de la clase de los silicatos) y la herramienta informática *Odontology Dissing Environment* (ODE) [Pinilla, P. 1999]. Lo primero se obtiene mediante la clasificación con los datos del conjunto de todas las especies minerales empleadas. Sin embargo, la adquisición de conocimientos tan específicos en la parte de información de la herramienta informática resulta más compleja, empezando por la comprensión y el manejo subsiguiente de la herramienta ODE, a la vez que se efectuó el estudio y el análisis de las aplicaciones realizada con esta misma herramienta por Fernández, M. (1996) sobre elementos de la Tabla Periódica (S.P) y por Rojas, M. D. (1998) para iones monoatómicos en variables físicas del medio ambiente.

Hay que resaltar que para el desarrollo de la Ontología de los minerales: la aplicación a la clase de los silicatos resulta imprescindible la necesidad de enlazar, entre otros, los conceptos químicos y físicos. Los químicos: Una Ontología de elementos, de los elementos Químicos, Físicas - Cantidades de Ontología, Dimensiones Estándares, las Unidades Estándares, Ontología Kif - Números de Ontología. Todas las Ontologías, en relación con los elementos del sistema

Clases de silicatos	Grupo SiO ₄ ²⁻
Nesosilicatos Sorosilicatos Ciclosilicatos Inosilicatos Filosilicatos Tectosilicatos	Grupos de tetraedros aislados Estructuras de tetraedros en parejas Estructuras en anillo Estructuras en cadena (sencilla o doble) Estructuras en láminas Estructuras tridimensionales

Tabla 2. Clasificación de los minerales del grupo de los silicatos según su grupo aniónico
 Table 2. Classification of the silicate-group minerals according to their anionic group

periódico, unidades y sistema de medida, la definición de magnitudes físicas que muestra la modelización de ontologías, y la aprehensión del saber.

La conceptualización o etapa siguiente se corresponde con la construcción del glosario de términos y el árbol de clasificación de conceptos, para proceder luego a la realización del diagrama de relaciones, el diccionario de conceptos y las diferentes tablas: a) Tabla de atributos de clase, b) Tabla de constantes, c) Tabla de sus formulaciones, d) Tabla de ejemplos y e) Tabla de relaciones. De esta forma en la Tabla (5) se muestra, a modo de ejemplo, el caso de una tabla de atributos de clase para la propiedad "simetría", que como se observa en la Tabla (3) corresponde con uno

de los atributos de clase para el caso de la Egirina (Brillo, Sistema de cristalización, Color, Densidad, Depósito mineral, Exfoliación, Fractura, Dureza, Paragénesis mineral, Fórmula estructural, Propiedades ópticas, Raya, Reactividad, Simetría, Substitución y Tenacidad).

Resultados

La aplicación de la herramienta ODE a los 84 minerales de la clase de los silicatos estudiados permite reunir y estructurar la información para cada uno de ellos independientemente y cuyos resultados se presentan

Nombre del concepto (N C)	Sinónimo (S)	Abreviatura (A)	Solicitud (I)	Atributos de la clase (A C)	Atributos de la solicitud (A I)
Egirina	Actima			Brillo Sistema de cristalización Color Densidad Depósito mineral Exfoliación Fractura Dureza Paragénesis mineral Fórmula estructural Propiedades ópticas Raya Reactividad Simetría Substitución Tenacidad	

Tabla 3. Parámetros considerados en la Ontología de los minerales. Aplicación a la clase de los silicatos. [N.C = Nombre del concepto; S = Sinónimo; A = Abreviatura; I = Solicitud; A C = Atributos de la clase; A. I = Atributos de la Solicitud]

Table 3. Parameters taken into account in the mineral ontology: application to the silicate class [N.C = concept name; S= synonym; A = abbreviation; I = request; A C = class attributes; A I = request attributes]

Ejemplo de mineral	Clase	Unidad mínima	Fórmula estructural
Olivino	Nesosilicato	(SiO ₄) ⁴⁻	(Mg, Fe) ₂ SiO ₄
Hemimorfita	Sorosilicato	(Si ₂ O ₇) ⁶⁻	Zn ₄ Si ₂ O ₇ (OH)·H ₂ O
Berilo	Ciclosilicato	(Si ₆ O ₁₈) ¹²⁻	Be ₃ Al ₂ Si ₆ O ₁₈
Enstatita	Inosilicato	(SiO ₃) ²⁻	MgSiO ₃
Antofilita	Inosilicato	(Si ₄ O ₁₁) ⁶⁻	Mg ₇ Si ₈ O ₂₂ (OH) ₂
Flogopita	Filosilicato	(Si ₂ O ₃) ²⁻	KMg ₃ (AlSi ₃ O ₁₀)(OH) ₂
Cristobalita	Tectosilicato	(SiO ₂)	SiO ₂

Tabla 4. Ejemplo de minerales de la clase de los silicatos
 Table 4. Examples of silicate-class minerals

en forma de: Ficha de la clase de los silicatos, Glosario de términos, Árbol de clasificación de conceptos, Diagrama de relaciones, Diccionario de conceptos, Tablas de atributos de clase, Tablas de axiomas lógicos, Tablas de constantes, Tabla de expresiones matemáticas, Tablas de ejemplos, Tablas de concepto - atributo de clase - valor, Tablas de relaciones, y por ultimo, Integración e implementación. A continuación y a modo de ejemplo se muestran los resultados obtenidos para el mineral Moscovita ó Mica blanca.

Ficha de la clase de los silicatos

La ficha descriptiva de cada uno de los minerales se obtiene por nueve descriptores, en donde para el caso de las propiedades físicas y químicas y los depósitos se han considerado 9, 6 y 3 parámetros diferentes respectivamente. Más adelante se muestra una de las fichas que se obtuvieron para la Moscovita (Figura 1).

Glosario de términos

Se refleja la definición para cada uno de los términos integrados en la ontología de 84 mineral, agregando la/s referencia/s bibliográfica/s empleadas con las definiciones. Los términos que incluye el diccionario

comprenden los minerales así como también cada uno de los conceptos o parámetros usados en la ontología.

Árbol de clasificación de concepto.

La clasificación de concepto de estos 84 minerales se logra por jerarquización en clases, subclases, etc. y así se construye el árbol de clasificación de concepto para cada uno de los minerales. La jerarquización se genera para todos los minerales por subclases y un ejemplo de ellas se da en la Tabla 3.

Diagrama de relaciones

Es una representación intermedia para solucionar los casos que, según el autor, el mineral se clasifica en familias diferentes. Por ejemplo, el berilo es un ciclosilicato, según Klein y Hurlbut (2001) y Perkins (1998) dice que es de la estructura de los silicatos.

Diccionario de conceptos

El resultado del diccionario de conceptos es un resumen de todos y cada uno de los términos, usados o

Nombre del atributo	Simetría
Tipo de valor	Filas
Unidad de medida	
Precisión	
Cardinalidad	(1, n)
Reducción	
Referencias	[Dana y Hurlbut, 1960]

Tabla 5. Tabla de atributos de clase para la simetría
 Table 5. Table of class attributes for symmetry



Figura 1. Mineral Moscovita. Propiedad de Rosario García Gimenez
Figure 1. Sample of muscovite (property of Rosario García Giménez)

Familia: Silicatos laminares
Grupo: Micas
Nombre: Moscovita
Sinónimo: Mica blanca
Composición química: $KAl_2 (Al Si_3 O_{10}) (OHF)_2$
Propiedades físicas:
1. Dureza: 2- 2 1/2
2. Peso específico: 2.76-2.88
3. Fractura: nula
4. Exfoliación: perfecta
5. Tenacidad: rígida
6. Propiedades ópticas: biáxico (-)
7. Brillo: vítreo
8. Color: blanco plateado
9. Color de la raya: blanco
Propiedades químicas:
Substitución: K por Na, Rb, Cs.
1. Al por Mg, Fe, Li, Mn, Ti, Cr, F por OH
2. Sistema de cristalización: Monoclínico
3. Clase de simetría: Prismática
4. Grupo de simetría: 2/m
5. Reactividad: resistente a los ácidos
Paragénesis: Cuarzo, Feldespatos
Depósitos:
1. Mundo: Brasil, Canadá, USA, India
2. Europa: Suiza
3. España: Andalucía, Galicia, Salamanca, Madrid.

Tabla 6. Características de la moscovita
Table 6. Characteristics of muscovite

que potencialmente pueden usarse, con los que se ha generado la ontología de los minerales de la clase de los silicatos.

Tablas de atributos de clase

La integración de las 17 propiedades agregadas a cada una de las fichas correspondientes a los 84 minerales de la clase de los silicatos, permite obtener una tabla de atributos de clase para cada uno de ellos, especificando un total de 1.428 tablas de atributos de clase. Cada una de las tablas especifica siete entradas que generan como resultado final un total de 9.956 caracteres. La moscovita genera 17 tablas correspondientes a 17 propiedades, de las que están presentes como resultado final y por ejemplo, la tabla de atributos de clase correspondiente a la propiedad "Sistema cristalino" (Tabla 5).

Tablas de axiomas lógicos

La gran dificultad para ubicar elementos comunes a todos los minerales de la clase de los silicatos hace que sean imposibles para completar la tabla de axiomas. Sin embargo se ha considerado en la ontología de minerales, manteniendo ocho campos libres, empleados por conveniencia para el manejo de la herramienta ODE.

Tablas de constantes

La inexistencia de constantes en el desarrollo de la ontología de los minerales de la clase de silicatos obvia la necesidad de introducir una tabla de constantes. Sin embargo, y de forma similar al caso de las tablas de axioma, se propone una tabla de constantes con seis campos libres.

Tablas de expresiones de matemáticas.

No existe como resultado final una tabla correspondiente a las expresiones matemáticas, para el desarrollo de esta ontología de minerales especificada en el desarrollo de ninguno de ellos. Si la tabla se introduce con el campo vacío, al igual que en los casos previos, la mencionada tabla se constituye de la forma siguiente para ser introducida en la herramienta ODE.

Tabla de ejemplos

La inexistencia de una tabla de ejemplo se debe única y exclusivamente a la generación de la ontología a nivel de concepto. El resultado único para considerar es la introducción en la herramienta ODE de una tabla

de ejemplos con dos ingresos y sus campos correspondientes vacíos.

Tablas de concepto - atributo de clase - valor

El resultado obtenido es una tabla de 84 campos, correspondientes a los minerales tratados con tres ingresos para cada uno de ellos. La tabla que se muestra para el caso de la Moscovita es de la forma que se ve en la Tabla 15.

Nombre	Descripción
Moscovita	Este mineral pertenece al grupo de las micas. [Battey y Pring, 1997; Klein y Hurlbut, 2001]

Tabla 7. Glosario de términos
Table 7. Glossary of terms

Tablas de relaciones

El resultado del diagrama de relaciones entre los

campos de Arco, Nodo de Origen, Valor de Nodo de Origen, Nodo de Destino y Valor de Nodo de Destino, genera dos tablas de relaciones diferentes para cada uno de 84 minerales que comprende la ontología. Las

Arco	Nodo origen	Valor del nodo origen	Nodo de destino	Valor del nodo de destino
Subclase de	Concepto	Silicato laminar	Concepto	Silicato
Subclase de	Concepto	Grupo de las micas	Concepto	Silicato laminar
Subclase en partición inconexa	Concepto	Moscovita	Concepto	Grupo de la mica
Subclase en partición exhaustiva	Concepto	Silicatos	Concepto	Mineral

Tabla 8. Árbol de clasificación de concepto
Table 8. Tree of concept classifications

Nombre del Concepto	Sinónimo	Abreviaturas	Solicitud	Atributos de clase	Atributos de Solicitud
Moscovita				Exfoliación Color Clase cristalina Sistema cristalino Densidad Fractura Dureza Brillo Depósito mineral Paragénesis mineral Propiedades ópticas Reactividad Substitución Simetría Raya Fórmula estructural Tenacidad	

Tabla 9. Diccionario de conceptos
Table 9. Dictionary of concepts

Nombre del atributo	Sistema cristalino
Tipo de valor	Filas
Unidad de medida	
Precisión	
Cardinalidad	(1, n)
Se reduce	
Referencias	[Klein y Hurlbut, 2001]

Tabla 10. Tabla de atributo de clase
Table 10. Table of class attributes

Nombre del axioma
Descripción
Concepto
Atributos referenciados
Relaciones referenciadas
Variables
Expresión
Referencias

Tabla 11. Tabla de axiomas lógicos
Table 11. Table of logical axioms

tablas de relaciones se encuentran constituidas por once ingresos y sus campos correspondientes.

Integración e implementación

La integración que refiere resultados inexistentes a esta fase de la metodología de trabajo no es especificada para el desarrollo de esta ontología reutilizando elementos de otras ontologías.

La implementación, en esta etapa, se ha obtenido mediante "Ontolingua" como herramienta informática capaz de traducir el modelo conceptual al modelo calculable. Ontolingua contiene consejos para desarrollar, examinar, mantener y compartir mediante un servidor. El Ontolingua lenguaje tiene su base en la sintaxis y semántica de KIF.

Nombre de la constante
Tipo de valor
Valor
Unidad de medida
Reducción
Referencias

Tabla 12. Tabla de constantes
Table 12. Table of constants

Nombre de la expresión matemática
Descripción en lenguaje natural
Atributos de clase específicos para los cálculos
Instancia de atributos específicos para los cálculos
Precisión del valor calculado
Restricciones de la expresión matemática
Referencias

Tabla 13. Tabla de expresiones matemáticas
Table 13. Table of mathematical expressions

Nombre del ejemplo
Atributos del ejemplo

Tabla 14. Tabla de ejemplo
Table 14. Table of examples

Conclusiones

En la actualidad, la aplicación de diferentes herramientas informáticas a los estudios e investigaciones medioambientales es precisa a diferentes niveles y para distintas variables del Medio Físico, como es el caso general de los minerales del Planeta Tierra. No obstante, dentro de las aplicaciones de las herramientas informáticas existentes hoy en día, algunas de ellas son desconocidas en otros campos de las ciencias, o al menos son empleadas en ámbitos muy pequeños, como es el caso de las Ontologías de

Nombre del concepto	Atributos de clase	Valores
Moscovita	Exfoliación Color Clase cristalina Sistema cristalino Peso específico Fractura Dureza Brillo Depósitos minerales Paragénesis mineral Propiedades ópticas Reactividad Substitución Clase de simetría Raya Fórmula estructural Tenacidad	Perfecta Plateada o blanca Prismática Monoclínico 2,76-2,88 Lisa en las láminas 2-21/2 Vítreo Andalucía, Salamanca, Galicia, Sierra de Guadarrama (España) Biotita, Feldespato, Cianita, Cuarzo, Estaurolita Indicatriz biáxica (-) Insoluble en ácidos y poco fusible Al por Cr, Mg, Mn, Fe(II), Fe(III), Li, Tl ; K por Cs, Na, Rb 2/m Blanca $K Al_2 (Al Si_3 O_{10}) (OH)_2$ Escasa

Tabla 15. Tabla de concepto - atributo de clase - valor
Table 15. Table of concept - class attribute - value

Nombre de la relación	Moscovita con grupo de la micas
Origen del concepto	Moscovita
Fuente del origen del concepto	-
Cardinalidad del origen del concepto	(1, n)
Concepto de destino	Grupo de las micas
Fuente del destino del concepto	-
Cardinalidad de los conceptos de destino	(1, n)
Atributos requeridos	-
Propiedades matemáticas	-
Relaciones inversas	Grupo de las micas con moscovita
Referencias	[Battey, MH y Pring, A 1997; Klein y Hurlbut, C.S, 2001]

Tabla 16. Tablas de relaciones
Table 16. Table of relationships

características diferentes a los diccionarios y los Tesoros.

La gran variedad de minerales existentes en el Planeta Tierra y la complejidad de su estudio desde el punto de vista no informático, es lo que ha hecho reducir la aplicación de esta herramienta informática (ontología) a una de las clases de minerales, en con-

creto a la clase de los silicatos, los más abundantes en la corteza terrestre.

En este trabajo se muestra la aplicación del programa ODE (Ontology Dising Environment), a través de una regla - basado en un sistema experto, un caso - basadas razones y un conocimiento ontológico -base. De forma que este sistema es capaz de mode-

lar la información para una clasificación mineralógica en concreto.

El programa ha permitido de forma accesible para cualquier usuario experto o no experto en este campo de la ciencia u en otros similares, la realización de consultas sobre la clase de minerales silicatados.

La posibilidad de utilizar ontologías de minerales de silicatos que intervienen en estudios de Medio ambiente, ayudando a la minimización, eliminación o corrección de un problema medioambiental, realizado a través del trabajo de un equipo multidisciplinar que podría beneficiarse de esta Ontología, ya que serviría de documentación tanto para los expertos como para los no expertos en dichos silicatos.

El sistema resolvió las situaciones de impasse en el sistema existente por la Ontología

Referencias

- Arano, S. 2005. *Los tesauros y las ontologías en la Biblioteconomía y la Documentación [on line]*. "Hipertext.net", núm. 3, 2005. <<http://www.hipertext.net>> [Consulta: 17/05/2009]. URL de esta página: <http://www.hipertext.net/web/pag260.htm>
- Aristóteles <http://es.wikipedia.org/wiki/Arist%C3%B3teles> (9 junio 2009)
- Base de conocimiento. <http://wikipedia.org/wiki/Base-de-conocimiento>
- Batley, M.H. y Pring, A. 1997. *Mineralogy for students*. Third Edition. Addison Wesley Longman. Higher Education, 217 pp.
- Bernaras, A., Laresgoiti, I. y Corera, J. 1996. Building and Reusing Ontologies for Electrical Network Applications. *Proceedings of the European Conference on Artificial Intelligence (ECAI96)*. Budapest, 298-302
- Bragg, L. y Claringbull, G.F. 1965. *Crystal Structures of Minerals*. G Bellan and Sons, Ltd. Lf. London. 409 pp
- Charles Robert Darwin. http://es.wikipedia.org/wiki/Charles_Darwin (9 junio 2009)
- Charles Robert Darwin <http://www.biografiasyvidas.com/monografia/darwin/> (9 junio 2009)
- Dana, J. y Hurlbut, C. S. 1960. *Manual de Mineralogía*. Reverte, S.A. Barcelona 604 pp.
- Deer, W.A., Howie, R.A. y Zussman, J. 1962. *Rock Forming Minerals. Non-silicates*. John Wiley and Sons. New York. Vol. 5. 371 pp.
- Deer, W.A., Howie, R.A. y Zussman, J. 1992. *An Introduction to the Rock Forming Minerals*. John Wiley and Sons. New York. 691 pp.
- Dudá, R. y Rejl, L. 1989. *La Gran Enciclopedia de los Minerales*. Susaeta, S.A., 824 pp.
- Duffus, John H. 1983. *Toxicología ambiental*. Ed. Omega, S.A. Barcelona, 324 pp.
- Ernst Heinrich Philipp August Haeckel http://es.wikipedia.org/wiki/Ernst_Haeckel (9 junio 2009)
- Fernandez Breis, J. T. 2003. *Un entorno de Integración de Ontologías para el Desarrollo de Sistemas de Gestión de Conocimiento*. Marzo 2003. Tesis Doctoral realizada en el departamento de Ingeniería de la Información y las Comunicaciones de la Universidad de Murcia. www.tdr.cesca.es/TDX/TDR_UM/TESIS/AVAILABLE/TDR-1123105-134449/FernandezBreis.pdf (2 de junio de 2009).
- Fernández López, M. 1996. *Chemicals: Una Ontología de Elementos Químicos*. Proyecto Fin de Carrera. Facultad Informática. Universidad Politécnica de Madrid.
- Fleischer, M. y Mandarino, J. A. 1991. *Glossary of Minerals Species, Mineralogical*. Record Inc., Tucson, Ariz. 256 pp.
- Gomez Perez, A., Fernandez Lopez, M. and Corcho, O. 2004. *Ontological engineering*. Springer-Verlag. London Limited.
- Gruber, T.R. 1993. *A translation. Approach to Portable ontology specification*. Knowledge Acquisition, 5 (2) 199-200 pp.
- International Mineralogical Association (IMA) <http://www.ima-mineralogy.org/>
- James Dwight Dana http://es.wikipedia.org/wiki/James_Dwight_Dana (9 junio 2009)
- Klein, C. y Hurlbut, C.S (Jr). 2001. *Manual de Mineralogía*. Reverte. 4ª Ed. Barcelona. Vol. 2, 289 pp.
- Mohedano Puerto, E. 2000. *Ontología de Parámetros de iones monoatómicos (Alcalinos e hidrógeno) en Variables Físicas y Humanas para Aplicaciones de Medio Ambiente*. Proyecto Fin de Carrera. Facultad de Informática. Universidad Politécnica de Madrid.
- Neches, R.E., Fikes, T., Finin, T.R., Gruber, R., Patil, T., Senator, K. y Swartout, W.R. 1991. *Enabling technology for Knowledge sharing*. AI. Magazine. Vol 12, N° 3, 36-56 pp.
- Ontología. Enciclopedia libre Wikipedia. <http://es.wikipedia.org/wiki/Ontolog%C3%ADa>. (16 junio 2009)
- Palache, C., Berman, H. y Frondel, C. 1944. *The System of Mineralogy*. John Wiley & Sons. 7ª ed. Vol Elements, Sulphides, Sulfosalts, Oxides. New York. 843 pp.
- Pinilla Ponz, P. 1999. *Ontología de Minerales. Aplicación a la clase de los Silicatos*. Tesis de Licenciatura. Ciencias Ambientales. Universidad Autónoma de Madrid.
- Real Academia Española; http://buscon.rea.es/drael/SrvltConsulta?Tipo_BUS=3&LEMA=ontology%C3%ADa (16 junio 2009)
- Repetto, M. 1997. *Toxicología fundamental*. Ed. Díaz de Santos. Madrid, 275 PP.
- Rich, E. 1987. *Artificial Intelligence*. Ed. Masson. Paris, 128 pp.
- Rojas Amaya, M. D. 1998. *Ontologías de Iones Monoatómicos en Variables Físicas del Medio Ambiente*. Proyecto Fin de Carrera. Facultad de Informática. Universidad Politécnica de Madrid.
- Sarmiento, F. O; Vera, F y Juncosa, J. 2000. *Diccionario de Ecología*. Ed. Abya Yala. 226 pp.
- Strunz, H. 1970. *Mineralogische Tabellen*. Akademische Verlagsgesellschaft, geest und Portig K. G. 5ª Ed. Leipzig. 621 pp.
- Swoogle semantic web search 2007 <http://swoogle.umbc.edu/>
- Swartout, W.R., Tatil, R., Knight, K., y Russ, T. 1997. Towards

distributed use of large-scale ontologies. *AAAI-97. Spring Symposium on Ontological Engineering. Stanford University*. May.
Vogel, C. G. 1988. *Gene Cognitif*. Masson. París, 233 pp.

Watson <http://watson.kmi.open.ac.uk/>
WordReference.com Diccionario de la lengua española
<http://www.wordreference.com/definicion/ontolog%C3%ADa>

Recibido: julio 2009

Revisado: noviembre 2009

Aceptado: marzo 2010

Publicado: julio 2010

