

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΑΝΑΛΥΣΗΣ, ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΥ ΚΑΙ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ  
ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΚΑΙ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ



ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΤΗ ΣΥΝΘΕΣΗ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΜΕ  
ΦΥΣΙΚΗ ΓΛΩΣΣΑ: ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΚΑΙ  
ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΕΝΣΩΜΑΤΩΜΕΝΩΝ  
ΒΙΟΔΙΥΛΙΣΤΗΡΙΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΒΑΣΙΛΗΣ ΜΑΓΙΟΓΛΟΥ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΑΝΤΩΝΗΣ ΚΟΚΟΣΗΣ

ΑΘΗΝΑ, 2014



## ***Ευχαριστίες***

*Θα ήθελα να ευχαριστήσω και να αφιερώσω τη συγκεκριμένη διπλωματική εργασία στην οικογένεια μου, τους φίλους μου και τους συμφοιτητές μου για τη συνεχή υποστήριξη τους.*

*Ένα ιδιαίτερο και μεγάλο ευχαριστώ στο καθηγητή μου κ. Κοκόση Αντώνη για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, τη καθοδήγηση, τις συμβουλές και τη συμβολή του στην πορεία της διπλωματικής καθώς και την ανάδειξη του συγκεκριμένου θέματος. Ακόμη, θα ήθελα να ευχαριστήσω πολύ την υποψήφια διδάκτορα και φίλη Μαρινέλλα Τσακάλοβα για τη συνεισφορά της και το πραγματικό ενδιαφέρον που έδειξε.*





**Abstract**

This thesis explores the use of natural language to promote synthesis technology in multi-disciplinary applications. The case is particularly challenging when the disciplines involve tacit knowledge and diverse sources of data and information to integrate. The synthesis of biorefineries is a typical case as it involves several disciplines such as agricultural sciences, process and chemical engineering, biology, and economics. Natural language formulations could automate the development of synthesis models without expecting that the user is an expert in mathematical optimization or process systems engineering. The approach deploys ontologies and enables the integration of data from different resources, the re-use of generic mathematical formulations, and the deployment of object-oriented models. The work is illustrated in the synthesis of value chain trees of biorefineries where the available knowledge includes data and models from heterogeneous sources. The thesis explains the use of ontologies to integrate and automate decisions, also to automate the synthesis of superstructures. Illustrations include (i) 82 different chemistries that lead to the production of more than 80 intermediate and final products based on biomass, and (ii) a waste water management system. The use of ontologies explains means to systematize the development of the superstructure, to customize features, also to invoke and optimize for the preferred paths and technologies. The work is extended to include scheduling and planning problems.

**Keywords:** Ontologies, Biorefineries, Process Synthesis, Integration, Management

## Περίληψη

Η συγκεκριμένη διπλωματική εργασία διερευνά τη χρήση φυσικής γλώσσας για την ενίσχυση της τεχνολογίας της σύνθεσης στις διεπιστημονικές εφαρμογές. Η περίπτωση αποτελεί πρόκληση ιδιαίτερα όταν οι εμπλεκόμενες επιστήμες περιλαμβάνουν λανθάνουσα γνώση και διαφορετικές πηγές δεδομένων και πληροφοριών. Η σύνθεση των βιοδυλιστηρίων είναι μια τυπική περίπτωση διεπιστημονικού πεδίου καθώς περιλαμβάνει διάφορες επιστήμες όπως γεωργικές, χημικής μηχανικής και μηχανικής διεργασιών, βιολογία, και οικονομικά. Οι διατυπώσεις με φυσική γλώσσα μπορούν να αυτοματοποιήσουν την ανάπτυξη των μοντέλων σύνθεσης χωρίς την απαίτηση εξειδικευμένων γνώσεων από το χρήστη όσον αφορά τη μαθηματική βελτιστοποίηση ή τη μηχανική συστημάτων διεργασιών. Η προσέγγιση χρησιμοποιεί οντολογίες και επιτρέπει την ενσωμάτωση δεδομένων από διαφορετικούς πόρους, την επαναληψιμότητα χρήσης γενικών μαθηματικών τύπων, και την ανάπτυξη αντικειμενοφόρων μοντέλων. Η παρούσα δουλειά εφαρμόζεται για τη σύνθεση των δέντρων αλυσίδων αξιοποιήσιμων χημικών των βιοδυλιστηρίων όπου η διαθέσιμη γνώση είναι ετερογενή δεδομένα και μοντέλα. Η εργασία εξηγεί τη χρήση των οντολογιών για την ενσωμάτωση και την αυτοματοποίηση αποφάσεων, καθώς και την αυτοματοποίηση της σύνθεσης υπερδομών. Οι εφαρμογές περιλαμβάνουν 82 διαφορετικά χημικά που οδηγούν στην παραγωγή περισσότερων από 80 ενδιάμεσων και τελικών προϊόντων με βάση τη βιομάζα, καθώς και ένα σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού. Η χρήση των οντολογιών εξηγεί τρόπους για την αυτοματοποίηση της ανάπτυξης των υπερδομών, την προσαρμογή χαρακτηριστικών, επίσης την επίκληση και βελτιστοποίηση επιθυμητών μονοπατιών και τεχνολογιών. Η διατριβή επεκτείνεται και σε προβλήματα σχεδιασμού και προγραμματισμού.

**Λέξεις κλειδιά:** Οντολογίες, Βιοδυλιστήρια, Σύνθεση Διεργασιών, Ενσωμάτωση, Διαχείριση



## ΣΥΝΟΠΤΙΚΑ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1. Εισαγωγή.....	1
2. Θεωρητικό Υπόβαθρο.....	5
3. Μεθοδολογία.....	42
4. Εφαρμογές και Αποτελέσματα.....	58
5. Συμπεράσματα και Συζήτηση.....	74
Παράρτημα Α.....	78
Παράρτημα Β.....	81
Βιβλιογραφία.....	83





# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1. <b>Εισαγωγή</b> .....	01
1.1. Περιγραφή προβλήματος.....	02
1.2. Στόχοι και πεδίο εφαρμογών.....	03
1.3. Επισκόπηση Διπλωματικής Εργασίας.....	04
2. <b>Θεωρητικό Υπόβαθρο</b> .....	05
2.1. Το σημασιολογικό διαδίκτυο.....	06
2.2. Οντολογίες.....	09
2.2.1. Η Οντολογία στη Φιλοσοφία.....	09
2.2.2. Η Οντολογία στην Επιστήμη Υπολογιστών.....	10
2.2.3. Η Οντολογία στην Επιστήμη και τη Μηχανική.....	12
2.2.4. Χαρακτηριστικά επίσημων οντολογιών.....	13
2.2.4.1. Κλάσεις και μέλη.....	14
2.2.4.2. Σχέσεις.....	14
2.2.4.3. Γνωρίσματα.....	16
2.2.4.4. Αξιώματα.....	17
2.3. Τμηματοποίηση.....	18
2.4. Τι δεν είναι οντολογία.....	19
2.5. Ταξινόμηση Οντολογιών.....	20
2.6. Ο συλλογισμός της περιγραφικής λογικής στο Σημασιολογικό Διαδίκτυο.....	26
2.6.1. RDF και RDFS.....	26
2.6.2. Η γλώσσα OWL.....	30
2.7. Γλώσσα ερωτήσεων SPARQL.....	31
2.8. Οι οντολογίες στα Συστήματα Πληροφοριών.....	33
2.8.1. Αρχιτεκτονική Οντολογιακών Πληροφοριακών Συστημάτων.....	33
2.8.1.1. Συστήματα με γενικευμένη αρχιτεκτονική.....	35
2.8.1.2. Συστήματα με αρχιτεκτονική στοχευμένη ως προς το τομέα.....	36
2.8.2. Πρόσβαση στις οντολογίες OWL προγραμματιστικά.....	37
2.8.2.1. Διεπαφή Προγραμματισμού Εφαρμογών (APIs) Τύπου 1.....	37
2.8.2.2. Διεπαφή Προγραμματισμού Εφαρμογών (APIs) Τύπου 2.....	38
2.9. Η έννοια του Βιοδυλιστηρίου.....	39
2.9.1. Επισκόπηση.....	39
2.9.2. Η έννοια του Βιοδυλιστηρίου: Συζήτηση σχετικά με τους ορισμούς της βιβλιογραφίας.....	39
2.9.3. Ενσωματωμένο Βιοδυλιστήριο.....	41
3. <b>Μεθοδολογία</b> .....	42
3.1. Αφαιρετική Σύλληψη του τομέα.....	43
3.1.1. Κατηγοριοποίηση των εννοιών.....	43
3.1.2. Αλληλεπίδραση των εννοιών.....	44

---

3.2. Η Σύνθεση στα Βιοδυλιστήρια.....	46
3.3. Οντολογιακή Μηχανική.....	48
3.4. Επιλογή και ανάπτυξη μοντέλων.....	52
3.5. Ανάπτυξη πλαισίου ενσωμάτωσης και διεπιφάνεια χρήστη (UI).....	54
<b>4. Εφαρμογές και αποτελέσματα.....</b>	<b>58</b>
4.1. Εφαρμογή για τα Βιοδυλιστήρια.....	59
4.2. Εφαρμογή για σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού.....	63
<b>5. Συμπεράσματα και συζήτηση.....</b>	<b>74</b>
<b>Παράρτημα Α.....</b>	<b>78</b>
<b>Παράρτημα Β.....</b>	<b>81</b>
<b>Βιβλιογραφία.....</b>	<b>83</b>

## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1. Αρχιτεκτονική του σημασιολογικού διαδικτύου.....	7
Σχήμα 2. Τύποι οντολογιών και αλληλεξαρτήσεις σύμφωνα με τον Guarino (1997b). Τα βέλη αναπαριστούν σχέσεις ειδίκευσης.....	22
Σχήμα 3. Εκτεταμένο πλαίσιο κατηγοριοποίησης.....	25
Σχήμα 4. Ένα παράδειγμα γραφήματος RDF. Οι κορυφές (κύκλοι) υποδηλώνουν υποκείμενα και αντικείμενα των τριπλετών, ενώ οι άκρες (βέλη) κατηγορούμενα. Τα URIs των κορυφών και των άκρων συντομογραφούνται χρησιμοποιώντας προθέματα, όπως και στο συντακτικό N3.....	28
Σχήμα 5. Παράδειγμα αρχείου RDF με συντακτικό N3.....	28
Σχήμα 6. Παράδειγμα αρχείου RDF με συντακτικό RDF/XML.....	29
Σχήμα 7. Απλή ερώτηση SPARQL για την οντολογία του παραδείγματος 1. Η ερώτηση ρωτάει για όλα τα μέλη («failures») που επηρεάζουν κάτι (κάποιο αντικείμενο).....	32
Σχήμα 8. Σύστημα αρχιτεκτονικής οντολογιών (Thanh Tran et al., 2007).....	36
Σχήμα 9. Διαδοχή και αλληλεξάρτηση των κατηγοριών των εννοιών.....	45
Σχήμα 10. Διαδικασία σύνθεσης των υπερδομών.....	47
Σχήμα 11. Απεικόνιση υπερδομής.....	47
Σχήμα 12. Επίδραση οντολογιών στις κατηγορίες εννοιών.....	48
Σχήμα 13. Απεικόνιση των κλάσεων μέσα από τον επεξεργαστή οντολογιών Protégé.....	49
Σχήμα 14. Σχέσεις που συνδέουν τις κλάσεις, εύρος και τομέας.....	50
Σχήμα 15. Ιδιότητες σχέσεων στην οντολογία.....	50
Σχήμα 16. Σχέσεις τύπου δεδομένων στην οντολογία.....	51
Σχήμα 17. Αλγόριθμος ερωτήσεων SPARQL για την εξαγωγή των υπερδομών.....	52
Σχήμα 18. Συνοπτική διαδικασία επιλογής και ανάπτυξης μοντέλων.....	54
Σχήμα 19. Πλαίσιο-διεπιφάνεια χρήστη για την εφαρμογή του Βιοδιωλιστηρίου.....	61
Σχήμα 20. Οπτική απεικόνιση των αποτελεσμάτων από τη διεπιφάνεια χρήστη.....	62
Σχήμα 21. Σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού, TOC: συνολικός οργανικός άνθρακας («total organic carbon»), EL: εγκλεισμός του TOC από βιολογική επεξεργασία στις δοκιμές Zahn-Wellens.....	64
Σχήμα 22. Οντολογιακές κλάσεις και σχέσεις αντικειμένου για το σύστημα αποβλήτων.....	66
Σχήμα 23. Τομέας και εύρος των σχέσεων τύπου δεδομένων της οντολογίας.....	67
Σχήμα 24. Βήματα λήψης αποφάσεων στην οντολογία ανάλογα με τους παραμέτρους των δεδομένων εισαγωγής.....	68

Σχήμα 25. UI για την εισαγωγή των απαραίτητων δεδομένων.....	69
Σχήμα 26. Επιλεγμένο μονοπάτι επεξεργασίας για το απόβλητο του παραδείγματος.....	70
Σχήμα 27. Επιλογή διεργασίας και ανάπτυξη του μοντέλου.....	71
Σχήμα 28. Διεπιφάνεια χρήστη (UI) και οι λειτουργίες των συστατικών της.....	72
Σχήμα 29. Δράσεις, λειτουργίες, μοντέλα και δεδομένα που ενσωματώνονται στο πλαίσιο.....	73



---

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ

---

## 1. Εισαγωγή

### 1.1. Περιγραφή προβλήματος

Η βελτιστοποίηση είναι ένα αναπόσπαστο κομμάτι της μηχανικής διεργασιών που βρίσκει εφαρμογή σε πλήθος προβλημάτων. Τα προβλήματα βελτιστοποίησης σχετίζονται άμεσα με μαθηματική μοντελοποίηση των στοιχείων του προβλήματος. Το γεγονός αυτό καθιστά την ίδια τη φύση της βελτιστοποίησης να θέτει όρια σε εκείνους που την χρησιμοποιούν. Προβλήματα με αυστηρά δομημένο μαθηματικό πρότυπο, δεδομένα μελετημένα και σαφώς ορισμένα και κριτήρια επιλογής συγκεκριμένης μορφής είναι το περιεχόμενο των μοντέλων βελτιστοποίησης.

Η μεταφορά γνώσης σε έναν τέτοιο χώρο είναι σχεδόν αδύνατη, καθώς είναι απαραίτητο να λάβει μορφή μια δομημένη μοντελοποίηση. Αποτέλεσμα αυτού είναι η βελτιστοποίηση να παραμένει ένα ανεκμετάλλευτο εργαλείο στα χέρια των ειδικών-δημιουργών των μοντέλων. Σε μεμονωμένες περιπτώσεις η τακτική αυτή είναι έως και επιθυμητή χωρίς να κρίνεται αναγκαία η επέμβαση και η γενίκευση. Σε τομείς όμως που απαιτείται διεπιστημονική γνώση και συνδυασμός μοντέλων, η βελτιστοποίηση παραμένει αναξιοποίητη. Ο μεγάλος όγκος της πληροφορίας, η σύνδεση της γνώσης που απαιτείται καθιστά τη βελτιστοποίηση στους διεπιστημονικούς τομείς ανέφικτη και χρονοβόρα, ιδιαίτερα για τους μη εμπειρογνώμονες. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αναποτελεσματικής εφαρμογής της βελτιστοποίησης είναι η Σύνθεση Διεργασιών.

Η Σύνθεση Διεργασιών (ΣΔ ή σύνθεση) είναι μια από τις σημαντικότερες δραστηριότητες της Μηχανικής Συστημάτων Διεργασιών (ΜΣΔ) (PSE – Process Systems Engineering) με μεγάλο εύρος εφαρμογών. Αποτελεί ένα χρήσιμο εργαλείο που είναι αλληλένδετο της βελτιστοποίησης και των προβλημάτων μοντελοποίησης και εφαρμόζεται σε διεπιστημονικά πεδία (χημικοί αντιδραστήρες, δίκτυα ενέργειας και χημικών, εναλλάκτες θερμότητας, χημικές μονάδες, κτλ.). Η μη εμπειρογνώμονες της ΜΣΔ δεν είναι εξοικειωμένοι με τη Σύνθεση Διεργασιών, με αποτέλεσμα η γνώση που προκύπτει να παραμένει αναξιοποίητη. Η γνώση αυτή είναι απαραίτητη για τη λήψη αποφάσεων και την ανάλυση αβεβαιότητας μέσω μοντέλων βελτιστοποίησης σε προβλήματα που αφορούν διεπιστημονικούς τομείς. Ένα χαρακτηριστικό διεπιστημονικό πεδίο είναι αυτό των βιοδυλιστηρίων. Για την επιτυχή και ολοκληρωμένη βελτιστοποίηση απαιτούνται γνώσεις από γεωργικές, οικονομικές, γεωπονικές επιστήμες, τη βιολογία, τη χημική μηχανική, τη μηχανική διεργασιών κτλ. Παράλληλα απαιτείται συντονισμός της γνώσης αυτής και ερμηνευση της σε πολύπλοκα δεδομένα και μαθηματικά μοντέλα με στόχο την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης.

Θεωρείται σκόπιμο και χρήσιμο να μελετηθεί ο τρόπος οργάνωσης και αναπαράστασης της γνώσης μέσω των οντολογιών ώστε η γνώση της σύνθεσης να αξιοποιηθεί επιλεκτικά, αποδοτικά και με επαναληψιμότητα. Η αναπαράσταση γνώσης (υποκατηγορία της Τεχνητής Νοημοσύνης) του τομέα που απαιτείται για την περιγραφή



των προβλημάτων επιτυγχάνεται μέσω των οντολογιών και είναι συμπληρωματική με την επεξεργασία της γνώσης μέσω φυσικής γλώσσας. Έχει επηρεαστεί από τη δημιουργία του W3C και συντονίζεται από το Σημασιολογικό Διαδίκτυο (η ιδέα της μετατροπής του Διαδικτύου και των πληροφοριών του σε ένα συνεργασιακό και αλληλένδετο χώρο κατανοητό από τους υπολογιστές ώστε οι εφαρμογές να μπορούν να κατανοούν, χρησιμοποιούν, να μοιράζονται και να τεκμηριώνουν τις πληροφορίες). Η αναπαράσταση γνώσης, καθώς και η διαχείριση της μέσω των οντολογιών αποτελούν αντικείμενο μελέτης της παρούσας διπλωματικής και εφαρμόζονται στη ΣΔ.

## 1.2. Στόχοι και πεδίο εφαρμογής

Ένας από τους στόχους της παρούσας μελέτης είναι η ανάπτυξη ενός γενικευμένου πλαισίου για την αυτοματοποιημένη μοντελοποίηση στη σύνθεση και στη βελτιστοποίηση στο τομέα των διεργασιών, χρησιμοποιώντας όρους φυσικής γλώσσας. Η σημασία του εγχειρήματος έγκειται στην ανάγκη δημιουργίας μιας κοινής γλώσσας που να επιτρέπει την εύκολη επικοινωνία των τελικών χρηστών με τα διαφορετικά μοντέλα ενός ή πολλαπλών τομέων. Συνήθως, τα μοντέλα που αναπτύσσονται μπορούν να χρησιμοποιηθούν μόνο από τους δημιουργούς τους λόγω της πολυπλοκότητας τους και των εξειδικευμένων γνώσεων που απαιτούνται για τον χειρισμό τους. Στις πολυσύνθετη εφαρμογές μεγάλης κλίμακας, όπως αυτή της σύνθεσης όπου απαιτείται συνδυασμός δεδομένων και χρήση μοντέλων από διαφορετικούς τομείς, οι χρήστες αδυνατούν να κατέχουν τη τεχνογνωσία για να ανταπεξέλθουν στις απαιτήσεις των χειρισμών όλων των μοντέλων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα οι δυνατότητες αυτών των εφαρμογών και των επιμέρους μοντέλων να μην αξιοποιούνται πλήρως, καθώς ο κάθε χρήστης αφιερώνεται στο μοντέλο της ειδίκευσης του, αγνοώντας την επίδραση των άλλων μοντέλων που σχετίζονται, καθώς και το ενδεχόμενο αλληλεπίδρασης με αυτά. Η θέσπιση ενός κοινού πλαισίου που θα παρέχει πρόσβαση στους μοντελιστές σε μοντέλα διαφορετικών τομέων, καθώς και την εύκολη επεξεργασία τους μέσω απλών φυσικών όρων που είναι κατανοητοί καθολικά, αποκαλύπτει νέες προοπτικές στη σύνθεση και τη βελτιστοποίηση.

Η φυσική γλώσσα αποτελεί μια πολύ παλιά έννοια που χρησιμοποιήθηκε πρώτα στην επιστήμη των υπολογιστών, και συγκεκριμένα στα έξυπνα συστήματα (Tuning, 1950). Παρόλαυτα, στη χημική μηχανική δεν έχει εφαρμοστεί σε μεγάλη έκταση. Ο ρόλος της φυσικής γλώσσας στα εννοιολογικά μοντέλα είναι (1) να αποκρύψει τη πολύπλοκη δομή της οντολογίας και των σύνθετων ερωτημάτων που απαιτούνται για την εξαγωγή των κατάλληλων εννοιών καθώς και (2) να αποκρύψει τις σύνθετες τροποποιήσεις που απαιτούνται στα μοντέλα ανάλογα με το πρόβλημα που περιγράφεται. Οι φυσικοί αυτοί όροι εμφανίζονται στην επιφάνεια εργασίας του χρήστη. Με απλά λόγια, η φυσική γλώσσα εκφράζει στο χρήστη τα πολύπλοκα ερωτήματα της οντολογιακής γλώσσας με απλά καθημερινά ερωτήματα, της μορφής «Τι μας συμφέρει να παράγουμε σε μια χημική

εγκατάσταση στη Βοιωτία?». Ιδιαίτερα στο τομέα της σύνθεσης όπου επικρατούν πολύπλοκα δίκτυα μοντέλων, τεχνολογιών, χημικών δομών, διάσπαρτης γνώσης είναι ιδιαίτερα σημαντική η συμβολή των οντολογιών για την αναπαράσταση και οργάνωση της γνώσης από τις διάφορες πηγές προέλευσης και η χρήση φυσικής γλώσσας.

Η χρήση φυσικών όρων (δηλαδή απλών λέξεων και φράσεων) κρύβει από πίσω πολύπλοκες μαθηματικές εξισώσεις, ισοζύγια, υπολογισμούς, αλγόριθμους, μοντέλα και δεδομένα. Αυτό επιτυγχάνεται στη συγκεκριμένη δουλειά, με την χρήση οντολογιών και της γλώσσας προγραμματισμού Java. Οι οντολογίες (ή και μοντέλα εννοιών) ερμηνεύουν τη γνώση του τομέα της σύνθεσης και της βελτιστοποίησης με έννοιες και σχέσεις. Ταξινομούν τις έννοιες ενός τομέα σε πολλαπλές τριπλέτες εγκαθιστώντας μεταξύ τους προηγμένες σχέσεις, ιδιότητες, περιορισμούς. Η αναζήτηση και ανάκτηση των εννοιών επιτυγχάνεται μέσω των ερωτημάτων SPARQL για τη γλώσσα οντολογιών OWL που χρησιμοποιείται στην περίπτωση μας.

Στην παρούσα εργασία εξετάστηκαν δύο διαφορετικές εφαρμογές που αναπτύχθηκαν σε ένα οντολογιακό πλαίσιο εκφρασμένο με φυσική γλώσσα. Η πρώτη και κύρια αφορά δύο ενσωματωμένα βιοδυλιστήρια που οδηγούν στην παραγωγή περισσότερων από 80 ενδιάμεσων και τελικών προϊόντων. Στην περίπτωση αυτή οι οντολογίες χρησιμοποιήθηκαν για την ανάπτυξη υπερδομών (δίκτυο πρώτων υλών, τεχνολογιών, χημικών, προϊόντων) που τροφοδοτούν μοντέλα βελτιστοποίησης. Η μορφή της υπερδομής καθορίζει το περιεχόμενο των μοντέλων. Στη δεύτερη περίπτωση το πρόβλημα σύνθεσης παίρνει τη μορφή ενός συστήματος διαχείρισης αποβλήτων νερού, όπου οι διεργασίες και τα αντίστοιχα μοντέλα του συστήματος αλληλεπιδρούν. Οι διαφορετικές παράμετροι επηρεάζουν τις διεργασίες και επομένως όλο το σύστημα. Οι οντολογίες επιστρατεύονται για την επίλυση του προβλήματος κατανομής που προκύπτει και την αυτοματοποίηση της διαμόρφωσης των βημάτων για τη λήψη απόφασης.

### 1.3. Επισκόπηση της Διπλωματικής Εργασίας

Στα παρακάτω κεφάλαια αναπτύσσονται αναλυτικά τα θεμέλια των οντολογιών και ο τρόπος χρήσης τους σε συνδυασμό με τη προγραμματιστική γλώσσα Java για την αναπαράσταση της γνώσης στη σύνθεση και την αυτοματοποιημένη ανάπτυξη των μοντέλων βελτιστοποίησης. Συγκεκριμένα στο κεφάλαιο 2 θα παρουσιαστούν κάποια θεωρητικά στοιχεία για τις οντολογίες, τα οντολογιακά συστήματα πληροφοριών, καθώς και για τα βιοδυλιστήρια που αποτελούν τη κύρια εφαρμογή. Στο κεφάλαιο 3 καταγράφεται η μεθοδολογία που ακολουθείται για την αναπαράσταση της σύνθεσης μέσω οντολογιών και τη τροφοδοσία των δεδομένων που ανακτώνται επιλεκτικά στα μοντέλα βελτιστοποίησης. Τέλος, στο κεφάλαιο 4 παρουσιάζονται δύο εφαρμογές της συγκεκριμένης μεθοδολογίας (i) για τα ενσωματωμένα βιοδυλιστήρια και (ii) ένα σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού, ενώ στο κεφάλαιο 5 συζητούνται τα συμπεράσματα που προέκυψαν και η μελλοντική εξέλιξη του αντικειμένου μελέτης.

---

## **ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ**

---

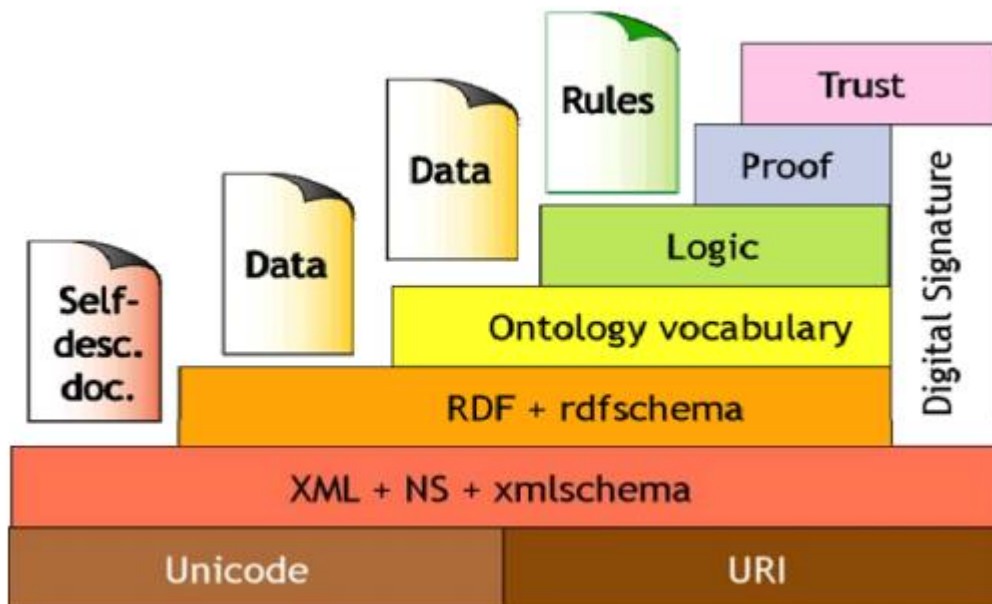
## 2. Θεωρητικό Υπόβαθρο

### 2.1. Το σημασιολογικό διαδίκτυο

Η μετεξέλιξη του World Wide Web στο Semantic Web αποτελεί ένα τεχνολογικό στόχο που πρώτη φορά τέθηκε ξεκάθαρα το 2001 από τον Tim Berners-Lee. Πρόκειται ουσιαστικά για την αναδιάρθρωση της λειτουργικότητας του διαδικτύου, μετατρέποντας το από έναν ωκεανό ασύνδετων πληροφοριών σε μία σημασιολογικά ταξινομημένη δεξαμενή γνώσης. Πρακτικός σκοπός αυτής της προσπάθειας είναι η βελτίωση της καθημερινότητας των ανθρώπων αναθέτοντας σε προγράμματα λογισμικού τη διεκπεραίωση εργασιών με πιο αποτελεσματικό, γρήγορο και ξεκούραστο τρόπο. Το σημασιολογικό διαδίκτυο αποσκοπεί στο να εξάγει σταδιακά τις πληροφορίες που βρίσκονται σήμερα διασκορπισμένες στο διαδίκτυο και να τις οργανώσει με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε να είναι επεξεργάσιμες από τις μηχανές που θα αναλάβουν αυτόν τον ρόλο. Με τον τρόπο αυτό θα αποτελέσουν τμήμα ενός γενικότερου οικοδομήματος γνώσης στο οποίο η πρόσβαση θα γίνεται με ομοιόμορφο και ενιαίο τρόπο. Άμεση συνέπεια αυτής της ομοιομορφίας θα είναι η διαφάνεια μεταξύ υπηρεσιών διαφορετικού χαρακτήρα και η κατ' επέκταση συνεργασία μεταξύ τους χωρίς την ανάγκη ανθρώπινης παρέμβασης για συντονισμό των επιμέρους καθηκόντων. Έτσι οι μηχανές δε θα επεξεργάζονται πλέον μηχανικά τα έγγραφα και τα δεδομένα αλλά θα τα «κατανοούν» ταυτοποιώντας τα με συγκεκριμένη σημασία και περιεχόμενο.

Παρακάτω δίδεται ένα παράδειγμα (Tim Berners-Lee et al., 2001), το οποίο σκιαγραφεί τις μελλοντικές δυνατότητες του σημασιολογικού διαδικτύου με άμεσο και παραστατικό τρόπο. Ας υποθέσουμε ότι μία ηλικιωμένη κυρία έχει μόλις επισκεφθεί το γιατρό της ο οποίος της έχει συστήσει να ακολουθήσει ένα ειδικό πρόγραμμα φυσιοθεραπείας, δύο φορές την εβδομάδα. Ο γιος της, Πέτρος, και η κόρη της, Λουκία, θα αναλάβουν τη μετακίνηση της μητέρας τους και γι' αυτό το λόγο πρέπει πρώτα να συνεννοηθούν. Εκμεταλλευόμενοι τις ευκολίες που το Σημασιολογικό Διαδίκτυο τους προσφέρει θέτουν το εξής αίτημα σε ειδικά προγράμματα τα οποία ονομάζονται πράκτορες λογισμικού: να βρεθεί ιατρικό κέντρο το οποίο να προσφέρει τις συγκεκριμένες υπηρεσίες, σε ακτίνα συγκεκριμένης χιλιομετρικής απόστασης από το σπίτι της ασθενούς και το οποίο να συμβαδίζει με το γεμάτο πρόγραμμα της Λουκίας και του Πέτρου όπως αυτό έχει διαμορφωθεί μέχρι στιγμής. Επιπλέον το εν λόγω ιατρικό κέντρο θα πρέπει να διαθέτει έγκυρη πιστοποίηση για την ποιότητα των υπηρεσιών του καθώς και να είναι συμβατό με την ασφαλιστική εταιρεία της μητέρας τους. Μέσα σε λίγα λεπτά εμφανίζεται ένα προτεινόμενο πλάνο που με προσοχή εξετάζουν ο Πέτρος και η Λουκία. Σύμφωνα με αυτό το πλάνο όμως ο Πέτρος θα πρέπει να διασχίσει ένα κεντρικό δρόμο της πόλης σε ώρα αιχμής, προοπτική όχι επιθυμητή γι' αυτόν. Προκειμένου να το αποφύγει θέτει εκ νέου το αίτημα στον πράκτορα με αυστηρότερα κριτήρια τοποθεσίας και χρόνου, επιτρέποντας του όμως να είναι περισσότερο ελαστικός σε άλλες παραχωρήσεις. Όντως

μετά από λίγη ώρα εμφανίζεται ένα αναδιαμορφωμένο πλάνο το οποίο ικανοποιεί και τους δύο από άποψη τοποθεσίας και χρόνου, αλλά δεν είναι συμβατό με την ασφαλιστική εταιρεία και επιπλέον υποχρεώνει τον Πέτρο να αναβάλει δύο από τις λιγότερο σημαντικές συναντήσεις του. Ωστόσο αποτελεί μία προτιμότερη επιλογή την οποία και αποφασίζουν να υιοθετήσουν τα δύο αδέρφια. Σίγουρα πρόκειται για ένα σενάριο το οποίο συγκρινόμενο με τη σημερινή πραγματικότητα εξοικονομεί σημαντική ποσότητα χρόνου (εάν π.χ. έπρεπε να αναζητήσουν μια λίστα με τα ιατρικά κέντρα και να τηλεφωνήσουν σε κάθε ένα από αυτά) και ακόμη διασφαλίζει ότι ερευνήθηκαν όλα τα δυνατά σενάρια για την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Κομβικό ρόλο στη διάδοση του σημασιολογικού διαδικτύου διαδραματίζουν τα προγράμματα εκείνα που ονομάζουμε πράκτορες λογισμικού. Στους πράκτορες λογισμικού ανατίθεται, όπως και στην καθημερινή ζωή, διεκπεραίωση εργασιών που απαιτούν ειδική διαδικασία αναζήτησης της γνώσης. Μία επιπρόσθετη εφαρμογή του Σημασιολογικού Διαδικτύου είναι η συμβολή που αναμένεται να έχει στη καθιέρωση μίας νέας γενιάς μηχανών αναζήτησης. Οι εν λόγω μηχανές αναζήτησης θα βασίζονται τη λειτουργία τους όχι στην καθιερωμένη λεξικογραφική συσχέτιση λέξεων-κλειδιών, αλλά σε μία αναζήτηση προσανατολισμένη στη σημασιολογία η οποία εξ' ορισμού θα εξαλείφει πιθανές δισημίες και αποτυχημένες ανακλήσεις εγγράφων. Το παρακάτω σχήμα (Σχήμα 1), παρμένο από μία παρουσίαση του Tim Berners-Lee το 2000 αναπαριστά την αρχιτεκτονική του εγχειρήματος του σημασιολογικού διαδικτύου. Τεχνολογίες που σχετίζονται με την αναπαράσταση της γνώσης και τη συλλογιστική απαρτίζουν κάθε στρώμα. Βασικό χαρακτηριστικό κάθε επιπέδου είναι η άμεση εξάρτηση του από το αμέσως κατώτερο επίπεδο στο οποίο βασίζεται και το οποίο επεκτείνει.



Σχήμα 1. Αρχιτεκτονική του σημασιολογικού διαδικτύου.

Στο κατώτερο επίπεδο βρίσκεται το διεθνώς καθιερωμένο πρότυπο κωδικοποίησης χαρακτήρων Unicode το οποίο καλύπτει όλες τις γλώσσες του πλανήτη με γραπτή υπόσταση. Επιπλέον στο επίπεδο αυτό συναντάμε το URI, που αποτελεί ένα σύστημα διευθυνσιοδότησης και ταυτοποίησης όλων των διαδικτυακών (και μη) πόρων. Πρόκειται για ένα σύστημα που επιδέχεται επεκτάσεις με τέτοιο τρόπο ώστε να καθορίζει μία αντιστοίχιση ένα προς ένα μεταξύ οποιωνδήποτε αντικειμένων του πραγματικού κόσμου (είτε πρόκειται για ηλεκτρονικά έγγραφα είτε πρόκειται για υλικά αντικείμενα) και μοναδικά καθορισμένων συμβολοσειρών. Το επόμενο επίπεδο σχετίζεται με την XML, μία ευρέως χρησιμοποιούμενη γλώσσα για την αναπαράσταση δεδομένων στο διαδίκτυο. Το βασικό της πλεονέκτημα είναι η δυνατότητα που δίνει στο χρήστη να ορίζει το δικό του λεξιλόγιο, χωρίς να υπάρχει κάποιο παγκόσμιο δεσμευτικό πρότυπο. Προχωρώντας προς τα πάνω συναντάμε την RDF και rdfschema δύο γλώσσες οι οποίες αποτελούν επέκταση της XML. Η RDF αναπαριστά ισχυρισμούς της μορφής υποκείμενο-ιδιότητα-αντικείμενο, ενώ η rdfschema είναι μία εμπλουτισμένη εξέλιξη της RDF που προσθέτει περαιτέρω δυνατότητες στην αναπαράσταση των ισχυρισμών όπως για παράδειγμα ιεραρχία κλάσεων, ιεραρχία ιδιοτήτων ή περιορισμούς στο πεδίο ορισμού και στο πεδίο τιμών μιας ιδιότητας. Κατόπιν συναντάμε τις οντολογίες στις οποίες θα αναφερθούμε εκτενώς αργότερα και στη συνέχεια μεταβαίνουμε στο λογικό επίπεδο το οποίο επιτρέπει τη λογική συσχέτιση μεταξύ διαφορετικών διαδικτυακών πόρων καθώς και τη χρησιμοποίηση κανόνων οι οποίοι απεικονίζουν τη σημασιολογική συγγένεια των δεδομένων. Ακολουθεί το επίπεδο των αποδείξεων που επιτρέπει την εξαγωγή συμπερασμάτων χρησιμοποιώντας τα υπάρχοντα δεδομένα. Επιπλέον προσφέρει στο χρήστη τη δυνατότητα επισκόπησης των λογικών βημάτων που μεσολάβησαν μεταξύ των συμπερασμάτων, αυξάνοντας την εμπιστοσύνη του χρήστη απέναντι στο σύστημα. Δεδομένου του αυξημένου βαθμού εχεμύθειας που απαιτούν οι κάθε λογής εφαρμογές του διαδικτύου η παρουσία των ψηφιακών υπογραφών είναι έντονη στα 4 τελευταία επίπεδα. Εγγυάται ασφάλεια στις συναλλαγές (οικονομικές ή άλλου είδους) και πιστοποίηση για την ταυτότητα των συμμετεχόντων. Τέλος το τελευταίο επίπεδο αναφέρεται στον έλεγχο της αξιοπιστίας ο οποίος είναι απαραίτητος προκειμένου να εμπιστευτούν και να χρησιμοποιήσουν οι χρήστες τις υπηρεσίες που το Σημασιολογικό Διαδίκτυο προσφέρει. Πρόκειται ουσιαστικά για ηλεκτρονικά έγγραφα που έχουν προκύψει ως αποτέλεσμα κάποιων συγκεκριμένων ενεργειών τις οποίες και πιστοποιούν. Έτσι εάν προκύψει θέμα εγκυρότητας θα είναι εύκολο χρησιμοποιώντας τα έγγραφα και ακολουθώντας μία σειρά υπολογιστικών βημάτων βασισμένα σε αυτά να επαληθευθεί η ισχύς των στοιχείων που περιέχουν. Όπως ήδη αναφέραμε ο βασικός τρόπος αναπαράστασης της πληροφορίας στα πλαίσια του Σημασιολογικού Διαδικτύου είναι οι οντολογίες, που αποτελούν κεντρικό θέμα της επόμενης ενότητας.

## 2.2. Οντολογίες

### 2.2.1. Η Οντολογία στη Φιλοσοφία

Ο όρος Οντολογία<sup>1</sup> προέρχεται από την αρχαία ελληνική φιλοσοφία. Πρώτος ασχολήθηκε με την έννοια των όντων ο Παρμενίδης ο Ελεάτης τον 4<sup>ο</sup> αιώνα π.Χ., στην συνέχεια ακολούθησαν ο Πλάτωνας και οι φιλόσοφοι της πλατωνικής σχολής, και τέλος ο Αριστοτέλης στα Μεταφυσικά του. Οι παραπάνω Έλληνες φιλόσοφοι προσέγγισαν πρώτοι, την έννοια της αφαίρεσης της σημασίας τους από τα αντικείμενα, και την διάκριση ανάμεσα στην πραγματική ουσία των όντων και στην συμβολική απεικόνισή τους στον ανθρώπινο λόγο και λογική.

Η Οντολογία έχει μελετηθεί από τότε μέχρι και σήμερα από πολλούς μεγάλους φιλόσοφους όπως τους Kant και Wittgenstein. Ακόμη και σήμερα η Οντολογία αποτελεί κομμάτι της σύγχρονης φιλοσοφίας, καλύπτοντας μεγάλα ερευνητικά έργα και επεκτείνοντας σε διαφορετικά πεδία όπως τη τεχνητή νοημοσύνη, τη θεωρία βάσης δεδομένων και την επεξεργασία με φυσικής γλώσσα. Σύμφωνα με την Εγκυκλοπαίδεια Φιλοσοφίας του Stanford (cf. Hofweber, 2005), η αρχή της σύγχρονης Οντολογίας συγγέει τέσσερα διαφορετικά μέρη:

(O1) Τη μελέτη του τι είναι, τι υπάρχει

(O2) Τη μελέτη των γενικότερων χαρακτηριστικών και σχέσεων των υπαρχουσών οντοτήτων

Ένα προαπαιτούμενο για το (O1) είναι η διευθέτηση των πραγμάτων που κάποιος πρέπει να πιστεύει (αρχικά) πριν αιτιολογήσει για την ύπαρξη κάποιων άλλων.

(O3) Τη μελέτη της οντολογικής δέσμευσης, δηλαδή την επίγνωση σε τι δεσμεύεται κάποιος

Γενικά, μια οντολογική δέσμευση στη ύπαρξη μιας οντότητας (A) γίνεται απαραίτητη έτσι ώστε να είναι δυνατή η δήλωση για την ύπαρξη μιας άλλης (B). Με άλλα λόγια, η ύπαρξη της οντότητας A προϋποθέτει ή υπονοεί την ύπαρξη της B.

---

<sup>1</sup> Υιοθετώντας την πρόταση των Guarino και Giaretta (1995), χρησιμοποιούμε το μη μετρήσιμο ουσιαστικό 'Οντολογία' (με κεφαλαίο 'Ο') όταν αναφερόμαστε στη φιλοσοφική αρχή. Αντίθετα το μετρήσιμο 'οντολογία' (με μικρό 'ο') αναφέρεται σε συγκεκριμένη οντολογική θεωρία, όπως 'η οντολογία του Αριστοτέλη' ή 'η οντολογία Cys'.

Τέλος το πεδίο των Οντολογιών ενσωματώνει

(O4) τη μελέτη της Μετά-Οντολογίας, δηλαδή ποιο έργο στοχεύει να επιτύχει η αρχή της Οντολογίας, πως πρέπει να κατανοηθούν οι ερωτήσεις, αν υπάρχουν, που στοχεύει να απαντήσει και με ποια μεθοδολογία. Παρακάτω, μια συγκεκριμένη οντολογική θεωρία αναφέρεται ως οντολογία (με μικρό 'ο'). Οι οντολογίες που μελετώνται επικεντρώνονται κυρίως στα κομμάτια (O1) και (O2).

Η οντολογία μπορεί να προσδιοριστεί σε διαφορετικά επίπεδα επιστημότητας. Σύμφωνα με τους Uschold & Grüninger (1996) και Hofweber (2005), μια οντολογία ορίζεται ως:

- Ανεπίσημη αν εκφράζεται με φυσική γλώσσα
- Ημι-ανεπίσημη αν εκφράζεται με περιορισμένη και δομημένη μορφή φυσικής γλώσσας
- Ημι-επίσημη αν εκφράζεται με τεχνητή και επίσημα ορισμένη γλώσσα
- (Αυστηρά) Επίσημη αν η οντολογία περιέχει ακριβή μαθηματικούς ορισμούς συγκεκριμένων οντοτήτων όσον αφορά τις ιδιότητες και τις σχέσεις τους με άλλες οντότητες. Τέτοιο ορισμοί συνήθως δίνονται σε μορφή αξιωμάτων που συντίθενται σε μια γλώσσα βασισμένη στη λογική. Αυτό επιτρέπει την απόδειξη ορισμένων ιδιοτήτων σχετικά με μια οντολογία, όπως τη συνέπεια<sup>2</sup>.

Οι επίσημες οντολογίες έχουν αποδειχθεί εφαρμόσιμες σε πολλά πεδία. Συγκεκριμένα ένα χαρακτηριστικό πεδίο εφαρμογής βασίζεται στη χρησιμοποίηση της επίσημης οντολογίας ως πλαίσιο αναπαράστασης πληροφοριών. Οι πληροφορίες που περιγράφονται από τέτοιο πλαίσιο παρέχουν εύκολη πρόσβαση για την αυτόματη επεξεργασία τους. Γι' αυτό το λόγο, οι οντολογίες έχουν γίνει αντικείμενο εντατικής έρευνας στην Επιστήμη Υπολογιστών καθώς και σε άλλους τομείς.

### **2.2.2. Η οντολογία στην Επιστήμη Υπολογιστών**

Τις τελευταίες δεκαετίες, ο όρος 'οντολογία' έχει υιοθετηθεί από επιστήμονες υπολογιστών και μηχανικών, αρχικά στο πεδίο της τεχνητής νοημοσύνης (TN) και πιο πρόσφατα σε άλλες περιοχές. Στη κοινότητα, ο όρος χρησιμοποιείται υπό στενότερη έννοια σε σχέση με το φιλοσοφικό περιεχόμενο του, υποδηλώνοντας μια επίσημη οντολογία για αναπαράσταση πληροφοριών<sup>3</sup>. Από την οπτική ενός συστήματος TN, η αντίληψη της οντολογίας είναι ισοδύναμη με τον αρχικό φιλοσοφικό ορισμό της

<sup>2</sup>Μια οντολογία είναι συνεπής αν δεν περιέχει αντιφατικές δηλώσεις ως προς τη λογική.

<sup>3</sup>Η 'αναπαράσταση γνώσης' χρησιμοποιείται συχνά ως συνώνυμο της 'αναπαράστασης πληροφοριών'.



Οντολογίας ως «υπαρξιακής θεωρίας», καθώς όπως το έθεσε Gruber (1995), «για τα συστήματα TN, το τι υπάρχει είναι αυτό που μπορεί να αναπαρασταθεί (επίσημα)».

Στην Επιστήμη Υπολογιστών, υπάρχουν δύο κύριες μορφές χρήσης μιας οντολογίας:

- Στη πρώτη μορφή η οντολογία λειτουργεί ως μια βιβλιοθήκη τμημάτων γνώσης για την αποτελεσματική κατασκευή έξυπνων συστημάτων. Για το σκοπό αυτό, η γενική οντολογία μετατρέπεται σε μια βάση γνώσης σύμφωνα με τις απαιτήσεις της αντίστοιχης εφαρμογής.
- Η δεύτερη μορφή χρησιμοποιεί την οντολογία ως λεξιλόγιο κοινοποίησης με στόχο την επικοινωνία μεταξύ ανθρώπων και λογισμικών. Σύμφωνα με τις αντίστοιχες λειτουργίες τους, τα μέσα επικοινωνίας μπορούν να έχουν διαφορετικές βάσεις γνώσεων, αλλά όλες πρέπει να είναι συνεπείς με την οντολογία (Gruber, 1995).

Και οι δύο μορφές χρήσης έχουν την ίδια απαίτηση από την οντολογία: και οι δύο προϋποθέτουν μια κοινή εκπροσώπηση γνώσεων με επαναληψιμότητα χρήσης σε διαφορετικά πλαίσια εφαρμογής. Στην πρώτη περίπτωση, αυτό είναι εμφανές. Στη δεύτερη, τα μέσα επικοινωνίας εκτελούν διαφορετικά έργα και προϋποθέτουν διαφορετικές βάσεις γνώσεων, και ως εκ τούτου η οντολογία πρέπει να είναι κατάλληλη για κάθε μια από αυτές. Συνεπώς, μια καταλλήλως σχηματισμένη οντολογία πρέπει να εφαρμοστεί και για τις δύο μορφές χρήσης. Ο Guarino (1998) υποδεικνύει ότι στη φιλοσοφία, ο όρος 'οντολογία' υποδηλώνει ένα εννοιολογικό πλαίσιο, ενώ στην Επιστήμη Υπολογιστών, η 'οντολογία' συχνά αλλά όχι πάντα αναφέρεται στο τεχνούργημα μηχανικής που χρησιμοποιείται για την αναπαράσταση αυτού του εννοιολογικού πλαισίου: «Με τη φιλοσοφική έννοια, αναφερόμαστε στην οντολογία ως ένα συγκεκριμένο σύστημα κατηγοριών που λαμβάνει υπόψη μια συγκεκριμένη οπτική του κόσμου. Έτσι, το σύστημα δεν εξαρτάται από μια συγκεκριμένη γλώσσα: η οντολογία του Αριστοτέλη είναι πάντα η ίδια, ανεξαρτήτων από τη γλώσσα που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της. Από την άλλη πλευρά, στην επικρατούσα χρήση της στη TN (Τεχνητή Νοημοσύνη), η οντολογία αναφέρεται στο τεχνούργημα μηχανικής, που αποτελείται από συγκεκριμένο λεξιλόγιο για την περιγραφή μια ορισμένης πραγματικότητας, και επιπλέον ένα πλήθος από σαφείς υποθέσεις όσον αφορά τη επιθυμητή έννοια των λέξεων του λεξιλογίου».

Στη συγκεκριμένη διπλωματική, ο όρος οντολογία χρησιμοποιείται διφορούμενα και με τις δύο έννοιες. Όταν είναι απαραίτητο, χρησιμοποιούνται οι φράσεις 'η οντολογία σε επίπεδο σύνταξης' όταν αναφερόμαστε στο μηχανικό τεχνούργημα, και 'οντολογία σε σημασιολογικό επίπεδο' όταν αναφερόμαστε στο αφηρημένο εννοιολογικό πλαίσιο.

Σημειώνεται ότι στην Επιστήμη Υπολογιστών, ο όρος ‘οντολογική δέσμευση’ έχει επίσης ειδική εξήγηση: αν κάποια ανθρώπινα ή λογισμικά μέσα συμφωνούν στην χρήση μιας οντολογίας για ένα συγκεκριμένο έργο με συνεπή τρόπο, τότε αυτά δεσμεύονται σε αυτή την οντολογία (Gruber & Olsen, 1994; Studer et al., 1998). Με άλλα λόγια, «ένα μέσο δεσμεύεται σε μια οντολογία αν οι παρατηρούμενες δράσεις του είναι συνεπείς με τους ορισμούς της συγκεκριμένης οντολογίας» (Gruber, 1995).

Συνοψίζοντας βασικός σκοπός χρήσης των οντολογιών είναι η δυνατότητα που μας προσφέρουν για συλλογιστική. Εφόσον αυτό που τις αποτελεί είναι μία αυστηρά οργανωμένη γνώση, είναι λογικό μία τέτοια δομή να είναι η πλέον κατάλληλη είσοδος για έναν αλγόριθμο που εκτελεί ελέγχους συνέπειας και απαντά σε λογικά ερωτήματα.

### 2.2.3. Οι οντολογίες στην Επιστήμη και τη Μηχανική

Οι οντολογίες και η οντολογική μηχανική παρόλο που ως πρακτικές έννοιες υπάρχουν εδώ και δεκαετίες, έχουν γνωρίσει ιδιαίτερη άνθιση μετά τη δημιουργία της OWL το 2004. Σύμφωνα με τον Hendler (2007), δεκάδες χιλιάδες οντολογίες χρησιμοποιούνταν το 2007. Παρόλο που οι περισσότερες από αυτές τις οντολογίες είναι αμελητέες προσπάθειες (δοκιμές, ακαδημαϊκές ασκήσεις, ελαφριές οντολογίες ή ψευδο-οντολογίες), παραμένει ένας σημαντικός αριθμός χρήσιμων συνεισφορών που έχουν τη δυνατότητα να εξελιχθούν σε μακροχρόνιες κοινόχρηστες οντολογίες. Οι οντολογίες αυτές καλύπτουν όλα τα είδη τομέων, όπως τα μαθηματικά (π.χ., EngMath ontology; Gruber & Olsen, 1994), τη μηχανική (π.χ., PhysSys ontology; Borst, 1997), τη χημεία (π.χ., ChEBI ontology; EBI, 2008), τη βιολογία (π.χ., Gene Ontology; GO, 2007), την ιατρική (π.χ., GALEN ontology; Rector et al., 1995;), τη γεωεπιστήμη (π.χ., GeoNames ontology; GeoNames, 2007), τη νομοθεσία (π.χ., LKIF-Core ontology; Hoekstra et al., 2007).

Επιπλέον, οι παρακάτω πηγές στο διαδίκτυο μπορούν να εξυπηρετήσουν ως σημείο εκκίνησης για την αναζήτηση μιας συγκεκριμένης οντολογίας:

- Η βιβλιοθήκη οντολογιών Protégé, που είναι μια διαδικτυακή πύλη που κοινοποιεί οντολογίες που χρησιμοποιούν τον επεξεργαστή οντολογιών Protégé. ([http://protegewiki.stanford.edu/index.php/Protege\\_Ontology\\_Library](http://protegewiki.stanford.edu/index.php/Protege_Ontology_Library)).
- Το Swoogle (<http://swoogle.umbc.edu/>) είναι μια ειδικευμένη μηχανή αναζήτησης στο διαδίκτυο για την ανίχνευση σημασιολογικών διαδικτυακών αρχείων και οντολογιών.
- Το SchemaWeb (<http://www.schemaweb.info/default.aspx>) είναι ένας κατάλογος συστημάτων και οντολογιών εκφρασμένα στις γλώσσες μοντελοποίησης RDFS, OWL, και DAML+OIL.

- Η βιβλιοθήκη οντολογιών DAML (<http://www.daml.org/ontologies/>), που περιέχει αρκετές εκατοντάδες οντολογίες στη γλώσσα μοντελοποίησης DAML+OIL.
- Η αποθήκη ανοιχτών οντολογιών βιοιατρικής (OBO – «Open Biomedical Ontologies»), που είναι μια βιβλιοθήκη από οντολογίες βιοιατρικής με δημόσια πρόσβαση σε διάφορες μορφές. Η πρόσβαση στην αποθήκη OBO είναι δυνατή μέσω της ιστοσελίδας (<http://obofoundry.org/>), μέσω του «Ontology Lookup Service» (<http://www.ebi.ac.uk/ontology-lookup/>), ή μέσω μιας διαδικτυακής εφαρμογής που ονομάζεται «BioPortal» (<http://www.bioontology.org/ncbo/faces/index.xhtml>).

Το πιο χαρακτηριστικό παράδειγμα οντολογίας μεγάλης κλίμακας στο πεδίο της Χημικής Μηχανικής είναι η οντολογία «OntoCAPE» (Ontology of Computer-Aided Process Engineering) (Morbach et al., 2007). Με βάση τις παραπάνω κατηγοριοποιήσεις προκύπτει ότι πρόκειται για μια επίσημη βαριά οντολογία που αναπαρίσταται με την γλώσσα μοντελοποίησης OWL. Αποτελείται από αρκετές υπο-οντολογίες που τελούν διαφορετικές λειτουργίες και μπορούν να χρησιμοποιηθούν ατομικά ή και ενσωματωμένες ταυτόχρονα. Οι υπο-οντολογίες οργανώνονται σε αποσπασματικά τμήματα που ξεχωρίζουν τη γενικότερη γνώση από τη γνώση σχετικά με συγκεκριμένους τομείς και εφαρμογές. Τα ανώτερα τμήματα έχουν τη μορφή οντολογίας ανώτερου επιπέδου καλύπτοντας γενικά θέματα όπως μερολογία, θεωρία συστημάτων, ποσότητες, μονάδες μέτρησης. Τα κατώτερα τμήματα προσδιορίζουν εννοιολογικά το τομέα των Διεργασιών της Χημικής Μηχανικής, καλύπτοντας θέματα στοχευμένα ως προς το τομέα όπως τα υλικά, τις χημικές αντιδράσεις, ή τη λειτουργία μονάδας (Marquardt et al., 2009).

#### 2.2.4. Χαρακτηριστικά Επίσημων Οντολογιών

Οι οντολογίες μπορούν να μοντελοποιηθούν με διαφορετικές τεχνικές μοντελοποίησης, και να εφαρμοστούν με διαφορετικά είδη γλωσσών (Uschold & Grüninger, 1996). Παραδείγματα κοινών τεχνικών μοντελοποίησης περιλαμβάνουν πλαίσια (π.χ., Minsky, 1975), λογική πρώτης ταξινόμησης (π.χ., Hodges, 1983), περιγραφική λογική (συντ.. DL; π.χ. Baader et al., 2003), τεχνικές μοντελοποίησης βάσεων δεδομένων (π.χ., Chen, 1976), και γλωσσών βασισμένων σε κανόνες (εν συντομία γλώσσες κανόνων; π.χ., Lloyd, 1987). Για κάθε παράδειγμα υπάρχουν πολλές εφαρμογές ή γλώσσες μοντελοποίησης. Παρόλη την ποικιλομορφία τους, οι διαφορετικές γλώσσες μοντελοποίησης έχουν δομικές ομοιότητες και συγκρίσιμα στοιχεία μοντελοποίησης. Συγκεκριμένα, οι περισσότερες γλώσσες περιέχουν κλάσεις, μέλη, σχέσεις, και ιδιότητες, παρόλο που μπορεί να έχουν διαφορετικές ονομασίες στις αντίστοιχες εφαρμογές. Επιπλέον, μερικές γλώσσες επιτρέπουν και τον ορισμό των αξιωμάτων. Στη συνέχεια παρουσιάζονται αναλυτικά τα διαφορετικά συστατικά των μοντέλων.

### 2.2.4.1. Κλάσεις και μέλη

Η κλάση αντιπροσωπεύει μια συλλογή οντοτήτων που μοιράζονται ένα κοινό χαρακτηριστικό. Ανάλογα με το αντίστοιχο παράδειγμα μοντελοποίησης, οι κλάσεις συμβολίζονται και ως έννοιες ή πλαίσια. Οι οντότητες που ανήκουν σε μια συγκεκριμένη κλάση είναι μέλη ή περιπτώσεις αυτής της κλάσης. Για παράδειγμα το νερό και η αιθανόλη είναι μέλη της κλάσης «ουσιών». Μερικές γλώσσες μοντελοποίησης επιτρέπουν τον ορισμό μετα-κλάσεων, τα μέλη των οποίων είναι πάλι κλάσεις.

Οι κλάσεις μπορούν να οργανωθούν ιεραρχικά μέσω σχέσεων υπαγωγής, που είναι γνωστές ως σχέσεις ειδίκευσης ή σχέσεις υποκλάσεων. Η κλάση B είναι ειδίκευση ή υποκλάση της κλάσης A αν κάθε μέλος της B είναι επίσης μέλος της A. Σε αυτή την περίπτωση, η B λέγεται ότι υπάγεται στην A, και η A καλείται υπερκλάση της B.

Μέσω αξιωμάτων είναι δυνατή η δήλωση ορισμένων ιδιοτήτων σχετικά με μια κλάση, όπως την ύπαρξη σχέσεων. Σε αυτό το πλαίσιο, δύο τύποι κλάσεων μπορούν να διακριθούν:

- Οι πρωτόγονες κλάσεις έχουν μόνο απαραίτητες συνθήκες (εκφρασμένες σε όρους των ιδιοτήτων τους) για τα μέλη τους. Ένα μέλος μιας πρωτόγονης κλάσης πρέπει πάντα να συμβαδίζει με τις ιδιότητες αυτής της κλάσης, αλλά μπορεί να υπάρχουν και άλλα μέλη με τις ίδιες ιδιότητες που δεν είναι μέλη αυτής της τάξης. Συνεπώς, τα μέλη των πρωτόγονων κλάσεων πρέπει να δηλωθούν ρητά.
- Οι ορισμένες κλάσεις χαρακτηρίζονται από απαραίτητες και επαρκή συνθήκες για τα μέλη τους. Ως εκ τούτου, ένα μέλος του οποίου οι ιδιότητες ταιριάζουν με αυτές μιας ορισμένης κλάσης, ενσωματώνεται αυτόματα ως μέλος της κλάσης αυτής. Παρομοίως, οι υποκλάσεις μιας ορισμένης κλάσης μπορούν να ενσωματωθούν αν οι ιδιότητες τους ταιριάζουν με τον ορισμό της κλάσης.

Οι περισσότερες γλώσσες υποστηρίζουν την κληρονομικότητα ανάμεσα στις κλάσεις με μια υπαγόμενη ιεραρχία. Η υποκλάση κληροδοτεί όλες τις ιδιότητες μιας υπερκλάσης. Ορισμένες γλώσσες επιτρέπουν και πολλαπλή κληρονομικότητα, εννοώντας ότι μια συγκεκριμένη κλάση μπορεί να κληροδοτήσει ιδιότητες από μια ή και περισσότερες υπερκλάσεις.

### 2.2.4.2. Σχέσεις

Μια σχέση αναπαριστά μια συσχέτιση ανάμεσα σε κλάσεις. Ανάλογα με το αντίστοιχο υπόδειγμα μοντελοποίησης, οι σχέσεις καλούνται επίσης ιδιότητες, ρόλοι, υποδοχές,

ενώσεις. Ενώ οι περισσότερες γλώσσες μοντελοποίησης παρέχουν μόνο δομές για δυαδικές σχέσεις (π.χ. σχέσεις ανάμεσα σε δύο κλάσεις), υπάρχουν κάποιες που έχουν ενσωματωμένες δομές για πολλαπλές σχέσεις εμπλέκοντας τρεις ή και περισσότερες κλάσεις. Στη συνέχεια ο όρος 'σχέση' χρησιμοποιείται ως συνώνυμο της 'δυαδικής σχέσης'. Προεπιλεγμένα, μια σχέση είναι μιας κατεύθυνσης, εννοώντας ότι στοχεύει από μια συγκεκριμένη κλάση τομέα προς μια ορισμένη κλάση εύρους. Για παράδειγμα, η σχέση *έχειΑντιδρών*<sup>4</sup> αναφέρεται από μια χημική αντίδραση (τομέας) σε μια ουσία (εύρος).

Μια σχέση αρχικοποιείται, εννοώντας ότι μπορεί να εφαρμοστεί ανάμεσα σε ένα μέλος μιας κλάσης τομέα και ένα μέλος μιας κλάσης εύρους. Για παράδειγμα, η παραπάνω σχέση *έχειΑντιδρών* μπορεί να παραπέμπει από την εστεροποίηση του οξικού οξέος (μέλος της χημικής αντίδρασης) στο μέλος αιθανόλη. Σε αντίθεση με τη κλάση μέλους, μια αρχικοποιημένη σχέση δεν έχει συγκεκριμένο όνομα, αλλά αναγνωρίζεται μέσω του τομέα και των μελών εύρους.

Μερικές γλώσσες επιτρέπουν τον περαιτέρω προσδιορισμό των σχέσεων με τη βοήθεια ιδιοτήτων σχέσεων (μερικές φορές καλούνται και ιδιότητες χαρακτηριστικών). Οι παρακάτω ιδιότητες σχέσεων είναι αρκετά κοινές, παρόλο που μια γλώσσα δεν τις υποστηρίζει όλες απαραίτητα:

- Μια σχέση μπορεί να σχετίζεται με μια άλλη σχέση υποδηλώνοντας ότι είναι αντίστροφη. Για παράδειγμα, η σχέση *είναιΑντιδρώνΤου* είναι αντίστροφη της *έχειΑντιδρών*, στοχεύοντας από μια ουσία σε μια χημική αντίδραση.
- Εναλλακτικά, μια σχέση μπορεί να δηλωθεί ως συμμετρική. Σε αυτή την περίπτωση είναι ισοδύναμη της αντιστρόφου της. Ένα διακριτό παράδειγμα είναι η σχέση *είναιΙσοδύναμοΜε*, που υπονοεί ότι αν το A είναι ισοδύναμο με το B, τότε και το B είναι ισοδύναμο με το A.
- Μια άλλη ιδιότητα είναι η αντισυμμετρία, που ορίζεται ως εξής δεδομένου μιας αντισυμμετρικής σχέσης Σ και δύο οντοτήτων A και B. Αν η A σχετίζεται με το B μέσω της σχέσης Σ, τότε τα A και B πρέπει να είναι πανομοιότυπα. Σημειώνεται ότι η συμμετρία και αντισυμμετρία δεν αμοιβαίως αποκλειστικά, καθώς η σχέση *είναιΙσοδύναμοΜε* είναι ταυτόχρονα και συμμετρική και αντισυμμετρική.
- Επιπλέον, μια σχέση μπορεί να δηλωθεί ως μεταβατική. Αυτό σημαίνει ότι αν οι οντότητες A και B σχετίζονται με μια μεταβατική σχέση Σ, καθώς και οι B και Γ μεταξύ τους, τότε η οντότητα A και Γ πρέπει επίσης να σχετίζονται με την σχέση Σ. Ένα συγκεκριμένο παράδειγμα είναι πάλι η σχέση *είναιΙσοδύναμοΜε*. Αν το A *είναιΙσοδύναμοΜε* B, και το B με το Γ, τότε και το A *είναιΙσοδύναμοΜε* το Γ.

<sup>4</sup> Οι σχέσεις που αφορούν την οντολογία απεικονίζονται με γραμματοσειρά «Italic» στο κείμενο.

- Μια σχέση μπορεί να δηλωθεί ως αντανακλαστική, εννοώντας ότι κάθε οντότητα στην οποία εφαρμόζεται μια αντανακλαστική ιδιότητα  $\Sigma$ , ιδιότητα ισχύει και για την ίδια. Για παράδειγμα, η σχέση *είναι Ισοδύναμο Με* είναι αντανακλαστική καθώς κάθε οντότητα είναι ισοδύναμη με την εαυτό της.
- Εναλλακτικά, μια σχέση μπορεί να είναι μη αντανακλαστική, ως συνέπεια μια οντότητα να μη σχετίζεται ποτέ η ίδια με αυτή την ιδιότητα. Η συγκριτική σχέση *είναι Μεγαλύτερο Από* είναι ένα τυπικό παράδειγμα μη αντανακλαστικής ιδιότητας. Καθώς για ένα μέλος με την ιδιότητα αυτή σε σχέση με κάποιο άλλο, δεν μπορεί να είναι και μεγαλύτερο από τον εαυτό του.
- Μια λειτουργική σχέση (αναφέρεται και ως λειτουργία) δεν μπορεί να έχει παραπάνω από ένα μοναδικό εύρος μελών. Αν ένα μέλος ενός τομέα σχετίζεται με περισσότερα εύρη μελών μέσω μια λειτουργικής σχέσης, συμπεραίνεται ότι όλα τα μέλη του εύρους είναι πανομοιότυπα. Για προφανή λόγους, η ιδιότητα δεν πρέπει να συνδυάζεται με τη μεταβατική.
- Το αντίθετο αποτέλεσμα επιτυγχάνεται με την αντιστρόφως λειτουργική σχέση. Αν δύο μέλη τομέα σχετίζονται με το ίδιο εύρος μελών μέσω μιας αντιστρόφως λειτουργικής σχέσης, τότε συνάγεται ότι τα μέλη του τομέα είναι πανομοιότυπα. Ως εκ τούτου, το εύρος μελών μιας τέτοιας σχέσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ανιχνευτές μοναδικότητας για τα μέλη του τομέα.

Σημειώνεται ότι το αντίστροφο μιας λειτουργικής σχέσης είναι αυτόματα η αντιστρόφως λειτουργική σχέση. Ακόμη, λίγες γλώσσες μοντελοποίησης αντιμετωπίζουν την υπαγωγή ως μια ειδική περίπτωση (μεταβατική, αντανακλαστική, και αντισυμμετρική) μιας σχέσης. Άλλες γλώσσες επιτρέπουν την ιεραρχική οργάνωση των σχέσεων, παρόμοια με αυτή των κλάσεων. Σε αντίθεση με την ιεράρχηση των κλάσεων, μια υποσχέση μπορεί να έχει ιδιότητες διαφορετικές από αυτές της υπερσχέσης.

### 2.2.4.3. Γνωρίσματα

Τα γνωρίσματα αντιπροσωπεύουν χαρακτηριστικά ή παραμέτρους των κλάσεων και των μελών τους. Ένα γνώρισμα αναγνωρίζεται από το όνομα του, δέχεται μια ή πολλαπλές τιμές που είναι συγκεκριμένες για τη κλάση ή το μέλος που περιγράφουν. Συνήθως, οι τιμές ενός γνωρίσματος περιορίζονται σε συγκεκριμένο τύπο δεδομένων όπως `boolean`, `string` (μεταβλητή), κέραςιο.

Συχνά, οι ίδιες δομές μοντελοποίησης χρησιμοποιούνται για την αναπαράσταση σχέσεων και γνωρισμάτων, με μόνη διαφορά το εύρος τους. Το εύρος μιας σχέσης δίνεται από το εύρος της κλάσης, ενώ το εύρος ενός γνωρίσματος προσδιορίζεται από το τύπο δεδομένων. Λόγω της απουσίας μιας κλάσης εύρους, οι περισσότερες από τις παραπάνω ιδιότητες των σχέσεων δεν μπορούν να εφαρμοστούν στα γνωρίσματα. Παρόλαυτα, είναι

δυνατό να δηλωθεί ένα γνώρισμα ως λειτουργικό ή αντιστρόφως λειτουργικό. Επίσης, τα γνωρίσματα μπορούν να ταξινομηθούν ιεραρχικά.

#### 2.2.4.4. Αξιώματα

Το αξίωμα μοντελοποιεί μια πρόταση που είναι πάντα αληθής. Γενικά, τα αξιώματα παρέχουν επιπρόσθετα μέσα για την αναπαράσταση γνώσεων. Επιτρέπουν τη θεσμοθέτηση τέτοιας γνώσης που υπερβαίνει την απλή ύπαρξη κλάσεων, σχέσεων και μελών. Επομένως, υποδείγματα μοντέλων που περιέχουν αξιώματα έχουν μεγαλύτερη εκφραστικότητα. Συγκεκριμένα, τα αξιώματα εξυπηρετούν στη

- Στο ρητό, σαφές ορισμό των σημασιολογικών (ή τουλάχιστον στον περιορισμό των πιθανών ερμηνειών και χρήσεων) μιας οντολογικής έννοιας, επιβάλλοντας περιορισμούς στις τιμές και/ή στις αλληλεπιδράσεις με άλλες έννοιες στην οντολογία.
- Στην επιβεβαίωση της συνέπειας της γνώσης που αναπαρίσταται στην οντολογία.
- Στη συναγωγή καινούργιας (δηλαδή, άρρητη προηγουμένως) γνώσης από ρητώς ορισμένα γεγονότα.

Επίσημα αξιώματα μπορούν να ενσωματωθούν στους ορισμούς των κλάσεων ή των σχέσεων, όπου προσδιορίζουν τις ιδιότητες τους. Στην πραγματικότητα, η δήλωση των προαναφερθέντων ιδιοτήτων σχέσεων επιτυγχάνεται συνήθως μέσω ενσωματωμένων αξιωμάτων.

Τα παρακάτω είναι κοινοί τύποι ενσωματωμένων αξιωμάτων σε μια κλάση:

- Η ασυναρτησία των κλάσεων. Αν οι κλάσεις A και B είναι δηλωμένες ως ασυνάρτητες, τότε ένα μέλος της κλάσης A δεν μπορεί να είναι ταυτόχρονα και μέλος της κλάσης B.
- Η ισοδυναμία των κλάσεων, εννοώντας ότι αυτές οι κλάσεις έχουν ακριβώς τα ίδια μέλη
- Η επέκταση μιας κλάσης μέσω της ρητής απαρίθμησης των μελών της

Ένας ακόμη κοινός τύπος ενσωματωμένων αξιωμάτων στις κλάσεις τοποθετεί περιορισμούς στις σχέσεις που προέρχονται από την αντίστοιχη κλάση. Σε αντίθεση με τις ιδιότητες σχέσεων, που είναι έγκυρες καθολικά, οι περιορισμοί αυτοί είναι συγκεκριμένοι στη κλάση τομέα, δηλαδή είναι έγκυροι μόνο τοπικά. Αυτοί οι τοπικοί περιορισμοί περιλαμβάνουν:

- (τοπικούς) περιορισμούς εύρους, αναφέροντας ότι το εύρος μιας σχέσης που προέρχεται από τη κλάση τομέα περιορίζεται σε ορισμένες κλάσεις.
- περιορισμούς πληθικότητας, που προσδιορίζουν τον ακριβή αριθμό ή το μέγιστο/ελάχιστο αριθμό εύρους των μελών για μια δοσμένη σχέση

- ειδικούς περιορισμούς πληθικότητας, που πέρα από τον προσδιορισμό του αριθμού του εύρους των μελών, υπαγορεύει επίσης το εύρος της κλάσης στην οποία τα μέλη αρχικοποιήθηκαν.

Τα παραπάνω εισήγαγαν ότι οι βασικοί τύποι αξιωμάτων μπορούν να συνδυαστούν σε πιο πολύπλοκες εκφράσεις. Για το σκοπό αυτό, οι γλώσσες οντολογίας παρέχουν επιπρόσθετες δομές, όπως τα λειτουργικά σύνολα ένωσης, διασταύρωσης, συμπληρωματικότητας.

Τέλος, οι κανόνες αποτελούν ένα επιπλέον ισχυρό μηχανισμό για τη δήλωση αξιωμάτων. Ένας κανόνας αξίωμα συντίθεται από ένα ηγούμενο (κορμός κανόνα) και ενός ακόλουθου (κεφαλή κανόνα). Τόσο το ηγούμενο όσο και το ακόλουθο είναι λογικές εκφράσεις, που κατασκευάζονται σε όρους των άλλων δομών της γλώσσας μοντελοποίησης. Όταν η προσδιοριζόμενη έκφραση στο ηγούμενο είναι αληθής, τότε η έκφραση του ακόλουθου πρέπει να είναι επίσης αληθής. Ως εκ τούτου, αν ένα ηγούμενο ταιριάζει με την υπάρχουσα κατάσταση της οντολογίας, τότε το ακόλουθο επιβεβαιώνεται, δηλαδή προστίθεται στην οντολογία. Σημειώνεται ότι, ενώ το ηγούμενο δεν είναι απαραίτητα αληθής, ο κανόνας στο σύνολο είναι καθολικά έγκυρος, και επομένως ταυτίζεται με τον παραπάνω ορισμό του αξιώματος. Τα κλασικά αξιώματα (δηλαδή, αξιώματα χωρίς προϋποθέσεις) μπορούν να μοντελοποιηθούν ως κανόνες με κενό το κορμό του κανόνα.

### 2.3. Τμηματοποίηση

Ουσιαστικά όλες οι σύγχρονες γλώσσες μοντελοποίησης των οντολογιών υποστηρίζουν την τμηματοποίηση τους, δηλαδή την υποδιαίρεση της οντολογίας σε μικρά διαχειρίσιμα κομμάτια. Αυτό προϋποθέτει δύο συμπληρωματικούς μηχανισμούς:

- I. μηχανισμό ομαδοποίησης για την ομαδοποίηση ενός υποσυνόλου αλληλεξαρτώμενων συστατικών των μοντέλων (κλάσεις, μέλη, σχέσεις, γνωρίσματα και συνδεδεμένα αξιώματα) σε μια κοινή ενότητα
- II. μηχανισμό συμπερίληψης ή εισαγωγής, που επιτρέπει την συμπερίληψη των συστατικών των μοντέλων μιας οντολογίας σε μια άλλη ενότητα. Με αυτό το τρόπο, μια οντολογία μπορεί να οργανωθεί ως μια ιεραρχία συμπερίληψης αλληλεξαρτώμενων υποοντολογιών.



## 2.4. Τι δεν είναι Οντολογία

Με την αυξανόμενη χρήση των διαδικτυακώς ενεργοποιημένων γλωσσών οντολογίας όπως της OWL (Smith et al., 2004; Bechhofer et al., 2004), ο όρος ‘ορολογία’ χρησιμοποιείται όλο και περισσότερο ένα πληθωριστικά για να υποδηλώσει όλα τα είδη δομών αναπαράστασης της γνώσης. Σε πολλές από τις περιπτώσεις, εικάζεται εσφαλμένα ότι η απλή χρήση μιας γλώσσας μοντελοποίησης οντολογιών, πληρεί τις προϋποθέσεις ώστε η αντίστοιχη δομή να χαρακτηριστεί ως οντολογία. Η αναπαράσταση μέσω μια γλώσσας μοντελοποίησης οντολογιών είναι απαραίτητο, αλλά όχι επαρκές κριτήριο για να χαρακτηριστεί ως (επίσημη) οντολογία. Παρακάτω, αναφέρονται δύο τύποι δομών παρόμοιων με αυτών των οντολογιών που όμως δεν ανήκουν στις πλήρως ανεπτυγμένες οντολογίες. Αποκαλούμε τους δύο αυτούς τύπους ως ψευδο-οντολογίες και ελαφριές οντολογίες αντίστοιχα. Στη συνέχεια, θα ορίσουμε αυτούς του όρους και θα εξηγήσουμε για δεν συμβαδίζουν με την ομολογουμένως αυστηρή σύλληψη της οντολογίας.

Ως ‘ψευδο-οντολογία’ εννοούμε το κομμάτι λογισμικού συστήματος που συντίθεται με μια επίσημη γλώσσα οντολογιών όπως την OWL, αλλά δεν έχει σχεδιαστεί ρητά με σκοπό την επαναληψιμότητα χρήσης. Ένα τυπικό παράδειγμα είναι η βάση γνώσεων ενός έξυπνου συστήματος. Μια τέτοια βάση γνώσεων ή καλύτερα το τμήμα της που είναι ανεξάρτητο των καταστάσεων μπορεί να θεωρηθεί ως οντολογία μόνο αν έχει επαναληψιμότητα χρήσης και μπορεί επομένως να διαμοιραστεί μεταξύ των λογισμικών εφαρμογών και από διαφορετικές ομάδες χρηστών<sup>5</sup>. Αν από την άλλη μεριά, η βάση γνώσεων έχει σχεδιαστεί για ένα μοναδικό σκοπό μόνο, τότε την ονομάζουμε ψευδο-οντολογία.

Εκτός από τις ψευδο-οντολογίες, μια δεύτερη κατηγορία δομών παρόμοιων με αυτή των οντολογιών πρέπει να διαφοροποιηθεί από αυτή των «αληθινών» οντολογιών. Σε αντίθεση με την προηγούμενη κατηγορία, ο παράγοντας διαφοροποίησης εδώ δεν είναι η επαναληψιμότητα χρήσης, αλλά ο σημασιολογικός πλούτος. Οι δομές αυτής της κατηγορίας δεν θεωρούνται ως πλήρως ανεπτυγμένες οντολογίες, καθώς δεν ορίζουν επίσημα τη σημασιολογία των όρων του λεξιλογίου μέσω ορισμών αξιωμάτων. Εξαιτίας του απλού εσωτερικού σχεδιασμού, αναφέρονται ως ‘ελαφριές οντολογίες’ στη βιβλιογραφία, εν αντιθέσει με τις ‘βαριές οντολογίες’, οι οποίες μοντελοποιούν το τομέα πιο αναλυτικά και θέτουν περισσότερους περιορισμούς στη σημασιολογία του τομέα (Gómez-Pérez et al., 2004). Ενώ μια ελαφριά οντολογία μπορεί να αναπαρασταθεί με μια επίσημη γλώσσα μοντελοποίησης οντολογιών, χρησιμοποιεί μόνο ένα υποσύνολο των διαθέσιμων στοιχείων μοντελοποίησης. Μια ελαφριά οντολογία χτίζεται χρησιμοποιώντας κλάσεις, μερικές φορές μέλη, και πιθανώς σχέσεις, αλλά δεν περιλαμβάνει ιδιότητες σχέσεων, τοπικούς περιορισμούς, ή άλλες μορφές αξιωμάτων. Τέσσερις τύποι ελαφριών οντολογιών μπορούν να διακριθούν:

- Το ελεγχόμενο λεξιλόγιο είναι μια λίστα προκαθορισμένων, επιτρεπτών όρων με σαφή περιγραφή δοσμένο σε φυσική γλώσσα. Οι όροι μπορούν να μοντελοποιηθούν σε κλάσεις ή μέλη, αλλά δεν υπάρχουν επιπλέον αξιωματικές προδιαγραφές των νοημάτων των όρων.
- Η ταξινόμηση είναι ένα ελεγχόμενο λεξιλόγιο που οργανώνεται με ιεραρχική δομή, η οποία μοντελοποιείται συνήθως μέσω υπαγωγικών σχέσεων.
- Ο θησαυρός είναι μια ταξινόμηση η οποία επιπλέον προσδιορίζει ορισμένες σημασιολογικές σχέσεις μεταξύ των όρων του λεξιλογίου. Σε αντίθεση με το σημασιολογικό δίκτυο, ο θησαυρός περιλαμβάνει μόνο λίγους τύπους σημασιολογικών σχέσεων (τυπικά τα συνώνυμα και αντώνυμα των όρων). Αυτές οι σχέσεις μπορούν να μοντελοποιηθούν με συνεταιριστικές σχέσεις.
- Το σημασιολογικό δίκτυο είναι ένας φορμαλισμός αναπαράστασης γνώσης, που περιγράφει τους όρους, τις σχέσεις τους σε μορφή ενός δικτύου που συντίθεται από επιγραφές, κόμβους και βέλη. Συνήθως, οι επιγραφές των κόμβων είναι ουσιαστικά και των βελών ρήματα. Με αυτό το τρόπο, η τριπλέτα που σχηματίζεται από δύο κόμβους και το αλληλοσυνδεδεμένο βέλος τους αντιπροσωπεύει μια δηλωτική πρόταση της μορφής υποκείμενο-κατηγορούμενο-αντικείμενο. Οι κόμβοι μπορούν να μοντελοποιηθούν ως κλάσεις και/ή μέλη, και τα βέλη μέσω συνεταιριστικών σχέσεων

Μερικοί οντολογιστές (e.g., Guarino, 1998; Lassila & McGuinness, 2001) προτιμούν μια βαθμιαία προσέγγιση στον ορισμό των οντολογιών. Δεν θέτουν κάποιο ξεκάθαρο διαχωρισμό ανάμεσα στις ελαφριές και βαριές οντολογίες, αλλά θεσπίζουν ένα «εύρος οντολογίας» (McGuinness, 2002), από απλές ταξινομήσεις μέχρι προηγμένες βαριές οντολογίες. Ξεκινώντας από τις ταξινομήσεις, το επίπεδο πολυπλοκότητας αυξάνεται με την προσθήκη μελών, σχέσεων, ιδιοτήτων των σχέσεων, τοπικών περιορισμών, και τέλος καθολικών αξιωμάτων.

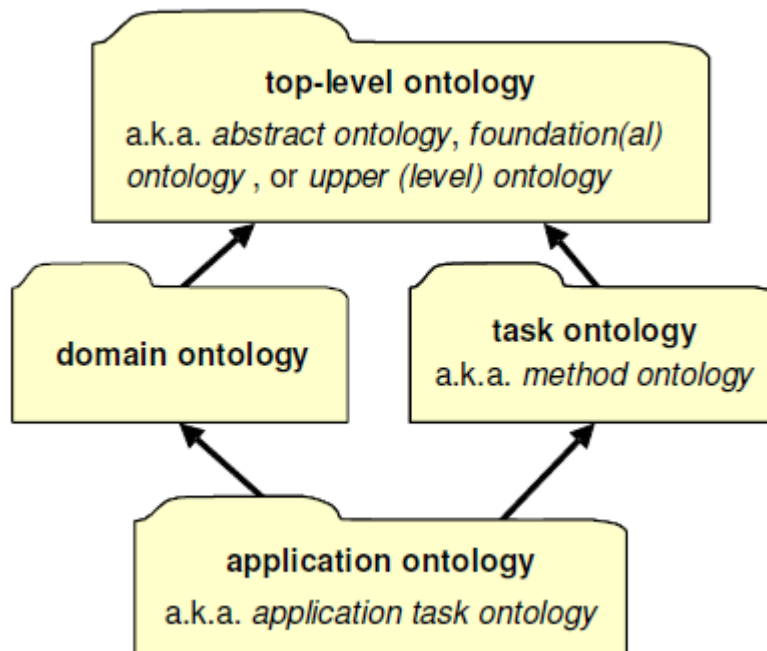
## 2.5. Ταξινόμηση των Οντολογιών

Στο σημείο αυτό παρουσιάζεται ένα πλαίσιο ταξινόμησης για τις οντολογίες και εξετάζονται οι αλληλεξαρτήσεις μεταξύ των διαφορετικών τύπων οντολογιών. Σύμφωνα με τον Guarino (1997b), οι οντολογίες μπορούν να ταξινομηθούν στους παρακάτω τύπους, που διακρίνονται από το επίπεδο εξάρτησης τους ως προς κάποιο έργο ή κάποια οπτική:

- Οντολογίες ανώτερου επιπέδου, που ορίζουν έννοιες με γενικό σκοπό όπως αντικείμενα, καταστάσεις, δράσεις κτλ., που είναι ανεξάρτητα από κάποιο πρόβλημα ή τομέα και επομένως μπορούν να εφαρμοστούν καθολικά. Στη βιβλιογραφία, οι οντολογίες ανώτερου επιπέδου αναφέρονται και ως αφηρημένες (π.χ., Borst, 1997), γενικές (π.χ., van Heijst et al., 1997a), θεμελιώδη (π.χ., Schneider, 2003), ανώτερες (π.χ., Guarino, 1998). Διακεκριμένα παραδείγματα ανωτέρου επιπέδου οντολογιών είναι η Ταξινόμηση Ανώτερων Στοιχείων από τον Sowa (1995), η UpperCyc (Lenat & Guha, 1990), ή η Προτεινόμενη Ενσωματωμένη Ανωτέρου Επιπέδου Οντολογία, εν ονόματι SUMO (Niles & Pease, 2001).
- Οντολογίες τομέα, που συλλαμβάνουν τη γνώση ενός τομέα εξειδίκευσης, όπως ιατρική ή μηχανική. Μια οντολογία τομέα δεν σχεδιάζεται ειδικά για ένα συγκεκριμένο έργο ή εφαρμογή, αλλά ορίζει γενικά τη γνώση του τομέα που είναι σχετική για ένα μεγάλο εύρος διαφορετικών έργων και εφαρμογών. Στόχος της οντολογίας είναι να είναι εφαρμόσιμη καθολικά (ως εκ τούτου να έχει επαναληψιμότητα χρήσης) μέσα στον αντίστοιχο τομέα εξειδίκευσης.
- Οντολογία έργου (συχνά αναφέρεται και ως οντολογία μεθόδου), που περιγράφει γενικές μεθόδους επίλυσης προβλημάτων που μπορούν να εφαρμοστούν σε διαφορετικά πλαίσια. Οι μέθοδοι αυτές αναφέρονται στο έργο, αλλά το ίδιο το έργο είναι γενικό, υπό την έννοια ότι συναντάται σε διαφορετικές εφαρμογές και τομείς εξειδίκευσης. Ένα παράδειγμα γενικού έργου είναι η αναζήτηση γραφημάτων, στην οποία διάφορες μέθοδοι αναζήτησης (π.χ. αναζήτηση βάθους ή πλάτους) μπορούν να προσδιοριστούν σε μια οντολογία έργου. Σημειώνεται ότι μια οντολογία έργου ουσιαστικά δεν πραγματοποιεί (δηλαδή, εφαρμόζει) τις μεθόδους, αλλά προσδιορίζει μόνο «την ορολογία για την έκφραση της αρμοδιότητας και των απαιτήσεων γνώσεις για μια μέθοδο» (Fensel et al., 1996). Για μια μέθοδο αναζήτησης η ορολογία θα μπορούσε να περιλαμβάνει τις έννοιες ‘τωρινός κόμβος’, ‘κόμβος που έχει επισκεφθεί’, ‘βάθος αναζήτησης’, κτλ. Αξίζει να σημειωθεί ότι η οντολογία τομέα και η οντολογία έργου έχουν διαφορετικούς αλλά συμπληρωματικούς στόχους όσον αφορά την επαναληψιμότητα χρήσης. Η πρώτη είναι εφαρμόσιμη σε διαφορετικά έργα αλλά περιορισμένη σε ένα συγκεκριμένο τομέα εφαρμογής. Η τελευταία προσδιορίζεται για ένα συγκεκριμένο έργο αλλά επαναλαμβάνεται μεταξύ διαφορετικών τομέων.
- Οντολογία εφαρμογής, που παρέχει έννοιες που απαιτούνται για μια συγκεκριμένη εφαρμογή. Για να ξεκαθαριστεί η διαφορά μεταξύ της οντολογίας εφαρμογής και της βάσης γνώσεων, ο Guarino (1997b) πρότεινε τον ακόλουθο ορισμό: Μια οντολογία εφαρμογής περιλαμβάνει μόνο πληροφορίες ανεξάρτητες από την κατάσταση (δηλαδή, γεγονότα που είναι πάντα αληθή), ενώ η βάση γνώσεων μπορεί να περιέχει επίσης πληροφορίες εξαρτώμενες από την

κατάσταση (δηλαδή, γεγονότα και υποθέσεις που σχετίζονται με μια συγκεκριμένη κατάσταση πραγμάτων).

Οι αλληλεξαρτήσεις μεταξύ αυτών των τεσσάρων τύπων οντολογίας απεικονίζονται στο Σχήμα 2. Σύμφωνα με τους Borst (1997) και Guarino (1997b), μια οντολογία έργου μπορεί να εισάγει την ορολογία από μια οντολογία ανώτερου επιπέδου και να τη χρησιμοποιήσει για τον προσδιορισμό μεθόδων. Με παρόμοιο τρόπο, μια οντολογία τομέα μπορεί να περιγράψει έννοιες του τομέα ως ειδίκευση των εννοιών ανώτερου επιπέδου. Επιπλέον, οι έννοιες της οντολογίας εφαρμογής μπορούν να οριστούν τυπικά συνδυάζοντας και εξευγενίζοντας τις έννοιες από την οντολογία τομέα και έργου. Αυτό διευκολύνεται αν η οντολογία τομέα και έργου δημιουργούνται στις ίδιες έννοιες ανώτερου επιπέδου και ως εκ τούτου μοιράζονται την ίδια οπτική. Για παράδειγμα, θεωρούμε μια οντολογία ανώτερου επιπέδου που εισάγει την ορολογία για την περιγραφή άμεσων γραφημάτων. Με βάση την ορολογία, μια οντολογία έργου θα μπορούσε να προσδιορίσει μια μέθοδο αναζήτησης για το γράφημα. Παρομοίως, μια οντολογία τομέα για τη χημική μηχανική θα μπορούσε να ορίσει την έννοια του διαγράμματος ροής διεργασιών ως μια ειδική μορφή κατευθυνόμενου γραφήματος. Μια οντολογία εφαρμογής θα μπορούσε τέλος να συνδυάσει τη γνώση του τομέα και τη γνώση για την επίλυση προβλημάτων, ώστε να συνθέσει μια εφαρμογή αναζήτησης για τα διάγραμμα ροής των διεργασιών.



Σχήμα 2. Τύποι οντολογιών και αλληλεξαρτήσεις σύμφωνα με τον Guarino (1997b). Τα βέλη αναπαριστούν σχέσεις ειδίκευσης

Ενώ το παραπάνω πλαίσιο κατηγοριοποίησης είναι κατά κανόνα ευρέως αποδεκτό, κάποια σημεία παραμένουν αμφιλεγόμενα. Η διαχωριστική γραμμή ανάμεσα στις οντολογίες ανωτέρου επιπέδου από τη μία, και των οντολογιών τομέα και εφαρμογής από την άλλη, είναι ασαφής, όπως παρατήρησε ο van Heijst et al. (1997a). Παρόλαυτα, συμφωνούν ότι ο διαχωρισμός τους είναι ενστικτωδώς σημαντικός και χρήσιμος για τη κατασκευή βιβλιοθηκών οντολογιών με επαναληψιμότητα χρήσης. Πιο επίμαχο σημεία είναι η ερώτηση για το αν είναι ή όχι εφικτό να διαχωριστεί γνώση του τομέα από τη γνώση των μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων (σύγκριση της συζήτησης ανάμεσα στους van Heijst et al., 1997a, 1997b, και Guarino, 1997a). Ο κορμός της συζήτησης είναι το λεγόμενο πρόβλημα αλληλεπίδρασης (Bylander & Chandrasekaran, 1988), που τονίζει το ακόλουθο: μια μέθοδος δεν μπορεί να περιγραφεί χωρίς να γνωρίζουμε τη γνώση του τομέα στον οποίο η μέθοδος θα εφαρμοστεί, και αντιστρόφως, η γνώση του τομέα δεν μπορεί αναπαρασταθεί επιτυχώς χωρίς να γνωρίζουμε ποια έργα ή μέθοδοι θα χρησιμοποιηθούν. Ο Guarino (1997a), ενώ καταρχήν παραδέχτηκε την εγκυρότητα αυτού του προβλήματος αλληλεπίδρασης, αμφισβητεί παρόλαυτα το αν αξίζει κάποιος να επιδιώξει την αναπαράσταση της γνώσης του τομέα ανεξαρτήτως από το έργο. Παρόλο που ο στόχος δεν μπορεί να επιτευχθεί πλήρως, είναι πιθανό να κατασκευαστεί μια οντολογία τομέα που να έχει επαναληψιμότητα χρήσης για ένα μεγάλο αριθμό διαφορετικών έργων. Ως προέκταση του παραπάνω πλαισίου κατηγοριοποίησης, κάποιοι συγγραφείς προτείνουν υποκατηγορίες και συνδυασμούς των τεσσάρων βασικών κατηγοριών των οντολογιών:

- Ο Gómez-Pérez et al. (2004) αναγνωρίζει τις λεγόμενες γενικές οντολογίες (van Heijst et al., 1997) ή κοινές οντολογίες (Mizoguchi et al., 1995) ως μια πρόσθετη ξεχωριστή κατηγορία οντολογιών. Σύμφωνα με αυτούς τους συγγραφείς, οι οντολογίες αυτού του τύπου αναπαριστούν γνώση κοινής λογικής που έχει επαναληψιμότητα χρήσης μεταξύ των τομέων. Παρόλαυτα, τα κριτήρια διαφοροποίησης μεταξύ των οντολογιών ανώτερου επιπέδου και των γενικών ή κοινών οντολογιών παραμένουν ασαφή. Κατά πάσα πιθανότητα, μια οντολογία ανωτέρου επιπέδου περιέχει μόνο έννοιες ανωτέρου επιπέδου, που πρέπει να ειδικευτούν σε οντολογίες τομέα και έργου για να αποκτήσουν επαναληψιμότητα χρήσης, ενώ οι έννοιες μιας κοινής οντολογίας είναι άμεσα εφαρμόσιμες. Ένας ειδικός τύπος κοινής οντολογίας είναι η υπερθεωρία. Ο όρος επινοήθηκε από τον Borst (1997) για να υποδηλώσει μια αφηρημένη οντολογία που ορίζει μια αυτοτελή θεωρία. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αυτής της κατηγορίας είναι οι οντολογίες μερολογίας και τοπολογίας που δημιουργήθηκαν από τον Borst (1997).
- Μερικοί συγγραφείς (π.χ., Mizoguchi et al., 1995; Gómez-Pérez et al., 2004) υποδιαιρούν ρητώς την οντολογία έργου σε κομμάτι έργου και σε κομμάτι

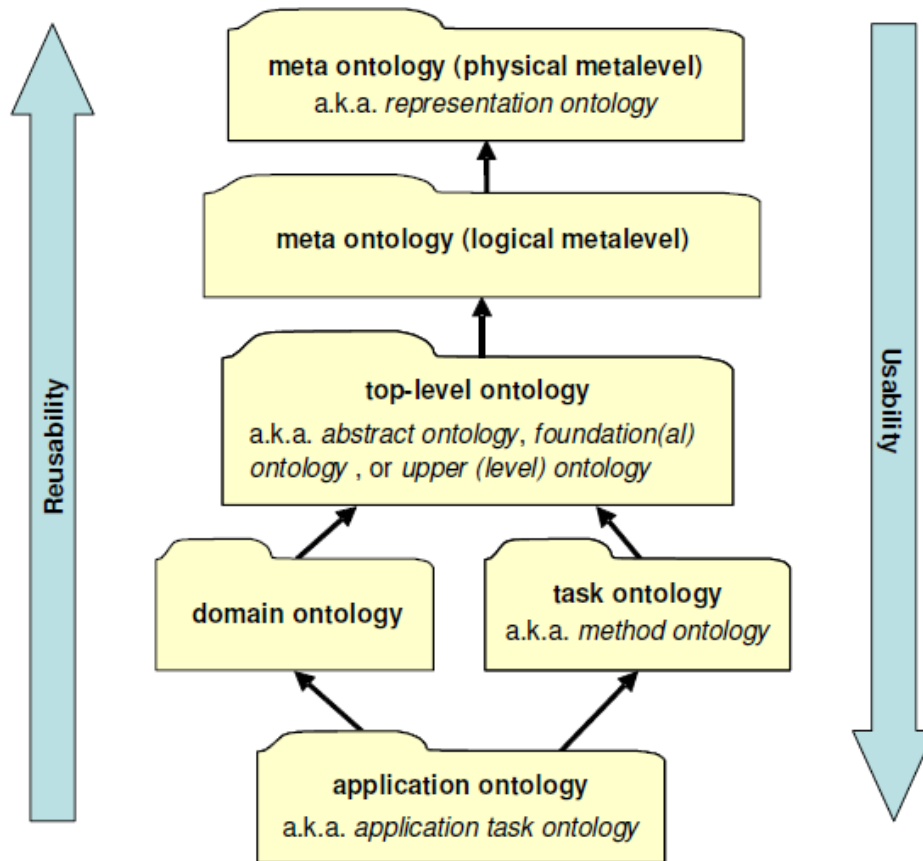
μεθόδου. Μόνο το πρώτο κομμάτι αναφέρεται ως ‘οντολογία έργου’, ενώ το δεύτερο καλείται ‘οντολογία μεθόδου’

- Ο Gómez-Pérez et al. (2004) εισήγαγε επίσης ένα τύπο οντολογίας τομέα-έργου που ορίζεται ως μια οντολογία έργου ανεξαρτήτου εφαρμογής που έχει επαναληψιμότητα χρήσης σε ένα δεδομένο τομέα, αλλά όχι σε όλους.
- Ο Râslaru-Bontas (2007) διαφοροποιεί την οντολογία εφαρμογής τομέα και την οντολογία εφαρμογής έργου. Η πρώτη εξευγενίζει και επεκτείνει το γενικό στόχο της γνώσης της οντολογίας τομέα στις απαιτήσεις μιας συγκεκριμένης εφαρμογής, ενώ η δεύτερη αντιστοιχεί ένα συνδυασμό του τομέα σχετικού με την εφαρμογή και της γνώσης σχετικά με το έργο, παρόμοια με τις οντολογίες εφαρμογής που εισήγαγε ο Guarino (1997b).
- Κάποιοι συγγραφείς (π.χ., Valente and Breuker, 1996; van Heist et al., 1997a; Doerr et al., 2003) προτείνουν έναν επιπλέον τύπο οντολογίας τη λεγόμενη οντολογία κορμού. Στη βιβλιογραφία, δεν υπάρχει κοινή σύγκλιση για το περιεχόμενο της οντολογίας κορμού. Μια οντολογία κορμού όπως προκύπτει (σύγκριση Brandt et al., 2008; Morbach et al., 2007; Κεφ. 5.2), περιλαμβάνει το κομμάτι ανωτέρου επιπέδου μιας οντολογίας εφαρμογής. Πιο συγκεκριμένα, η λειτουργία μιας οντολογίας κορμού είναι (1) η επιλογή και η ανάκτηση εννοιών ανωτέρου επιπέδου που είναι σχετικές με μια συγκεκριμένη εφαρμογή από τις αντίστοιχες οντολογίες τομέα και έργου, (2) ο προσδιορισμός των εννοιών που θα χρησιμοποιηθούν (δηλαδή, να ερμηνευτούν) από την εφαρμογή, και (3) η εισαγωγή πρόσθετων εννοιών ανωτέρου επιπέδου που απαιτούνται από την εφαρμογή και που δεν μπορούν να ανακτηθούν από τις διαθέσιμες οντολογίες.

Ένας επιπλέον τύπος οντολογίας, που δεν αναφέρεται στο παραπάνω πλαίσιο κατηγοριοποίησης, είναι η λεγόμενη οντολογία αναπαράστασης (γνώσεων). Οι οντολογίες αυτές εξηγούν την αφαιρετική σύλληψη που διέπει τους φορμαλισμούς της αναπαράστασης της γνώσης (Davis et al, 1993). Στοχεύουν να είναι ουδέτερες σε σχέση με τις παγκόσμιες οντότητες (Guarino & Boldrin, 1993). Δηλαδή, να προβάλλουν ένα πλαίσιο αναπαράστασης χωρίς να κάνουν δηλώσεις σε σχέση με το κόσμο (van Heijst et al., 1997a). Οι οντολογίες ανωτέρου επιπέδου καθώς και οι οντολογίες τομέα και έργου περιγράφονται μέσω των θεμελιακών στοιχείων που προέρχονται από τις οντολογίες αναπαράστασης. Γνωστά παραδείγματα τέτοιου τύπου οντολογιών είναι η Οντολογία Πλαισίου (Gruber, 1993) ή οι οντολογίες αναπαράστασης για τις γλώσσες RDFS (W3C, 2000) και OWL (W3C, 2002) του Σημασιολογικού Διαδικτύου (Semantic Web).

Τέλος, η ιδέα ενός μετά-μοντέλου ή μετά-οντολογίας πρέπει να οριστεί. Γενικά, ένα μετά-μοντέλο είναι «ένα πλαίσιο σχεδιασμού, που περιγράφει τα βασικά στοιχεία του μοντέλου και τις σχέσεις μεταξύ των στοιχείων αυτών καθώς και τη σημασιολογία τους. Αυτό το πλαίσιο ορίζει επίσης τους κανόνες για τη χρήση [...] των στοιχείων και των

σχέσεων του μοντέλου» (Ferstl & Sinz, 2001, p. 86). Υπάρχουν δύο πιθανές ερμηνείες του όρου ‘μετά-μοντέλου’ που είναι συνεπείς με αυτό τον ορισμό: για την διαφοροποίηση τους οι Atkinson & Kühne (2002) επινόησαν τους όρους φυσικό μεταεπίπεδο και λογικό μεταεπίπεδο. Ένα μετά-μοντέλο στο φυσικό μεταεπίπεδο ορίζει τις έννοιες και τους μηχανισμούς της γλώσσας μοντελοποίησης και συνεπώς είναι ισοδύναμο με μια οντολογία αναπαράστασης. Αντίθετα, ένα μετα-μοντέλο στο λογικό μεταεπίπεδο καθοδηγεί την ανάπτυξη της ίδιας της οντολογίας μέσω προκαθορισμένων τύπων και μοτίβων, που αντιπροσωπεύουν την καλύτερη πρακτική μοντελοποίησης.



Σχήμα 3. Εκτεταμένο πλαίσιο κατηγοριοποίησης

Το Σχήμα 3 παρουσιάζει το εκτεταμένο πλαίσιο κατηγοριοποίησης, που περιλαμβάνει επιπλέον τους τύπους μετα-οντολογιών. Επίσης, στο σχήμα απεικονίζεται ο βαθμός χρηστικότητας και επαναληψιμότητας χρήσης των αντίστοιχων τύπων οντολογιών. Η χρηστικότητα αυξάνει με το βαθμό ειδίκευσης του τύπου της οντολογίας, ενώ η επαναληψιμότητα χρήσης μειώνεται.

## 2.6. Ο συλλογισμός της περιγραφικής λογικής στο Σημασιολογικό Διαδίκτυο

Σήμερα, η OWL και OWL 2 είναι οι συνήθεις γλώσσες για την αναπαράσταση σημασιολογικών οντολογιών διαδικτύου. Η δημιουργία τους μπορεί να εξεταστεί από δύο οπτικές. Πρώτον, η OWL προήλθε από τις αρχές του σημασιολογικού διαδικτύου (Tim Berners-Lee et al., 2001) και επομένως μπορεί να θεωρηθεί ως μια εκφραστική σημασιολογική γλώσσα σχολιασμών και διάδοχος της RDFS. Δεύτερον, η OWL και OWL 2 υποστηρίζονται από τις εκφραστικές αλλά και καθοριζόμενες περιγραφικές λογικές SHOIN και SROIQ που έχουν εμφανιστεί τα τελευταία χρόνια ως αποτέλεσμα εντατικής έρευνας στην πολυπλοκότητα και αποκρισιμότητα των εκφραστικών περιγραφικών λογικών. Οι περιγραφικές λογικές παρέχουν λεπτομέρειες για τον έλεγχο της συνέπειας και άλλες βασικές λειτουργίες συλλογισμού. Αυτές οι λειτουργίες χρησιμοποιούνται για την αξιολόγηση των ερωτήσεων έκφρασης. Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι RDF, RDFS, OWL και OWL 2 καθώς και η γλώσσα ερωτήσεων SPARQL για την RDF.

### 2.6.1. RDF and RDFS

Οι «Προτάσεις της W3C» για την RDF και RDFS, που τυποποιήθηκαν το 2004, έγιναν από τα πρώτα ευρέως αποδεκτά τεχνικά μέσα για την πραγματοποίηση του σημασιολογικού διαδικτύου. Λόγω των αμοιβαίων εξαρτήσεων τους, οι RDF και RDFS συχνά θεωρούνται ως μια γλώσσα, που υποδηλώνεται ως RDF(S). Οι επίσημοι ορισμοί και λεπτομέρειες σχετικά με τις δομές είναι διαθέσιμα στις επίσημες ιστοσελίδες του W3C (Patrick Hayes (2004), Jeremy J. Carroll & Graham Klyne (2004), Ramanathan V. Guha & Dan Brickley (2004)). Η RDF περιγράφει τη γνώση σχετικά με τους πόρους του διαδικτύου με μορφή ενός πολύ-γραφήματος. Ένα αρχείο RDF αποτελείται από τριπλέτες (άκρα γραφήματος), καθεμία από αυτές είναι της μορφής Υποκειμένου-Κατηγορούμενου-Αντικείμενου. Το Υποκείμενο και Αντικείμενο αντιπροσωπεύονται με κορυφές στο γράφημα, ενώ το Κατηγορούμενο αποτελεί μια άκρη στο γράφημα, δηλαδή μια δυαδική σχέση ανάμεσα στο Υποκείμενο και το Αντικείμενο. Υπάρχουν τρία βασικά αντικείμενα στην RDF:

- **URIs**, που αντιπροσωπεύουν διορισμένους πόρους (μια σειρά χαρακτήρων για τον προσδιορισμό ενός συγκεκριμένου πόρου) (URI Planning Interest Group, 2001) π.χ. <http://krizik.felk.cvut.cz/ontologies/2011/example.owl#Failure>, που υποδηλώνεται με `f : Failure` στο Σχήμα 4.
- **Κενοί κόμβοι**, που αντιπροσωπεύουν ανώνυμους πόρους, π.χ. το `q` στο Σχήμα 4.
- **Λεκτικά σύνολα**, που αντιπροσωπεύουν βασικές τιμές δεδομένων (ακέραιους, μεταβλητές, κτλ.)



Μόνο τα URIs (Uniform Resource Identifiers) ή οι κενοί κόμβοι υπηρετούν ως αντικείμενα των τριπλετών και μόνο τα URIs ως κατηγορούμενα. Επιπλέον, η RDF ορίζει και κάποιες δομές, όπως δοχεία (σάκους, ακολουθίες, διεξόδους) και συλλογές (λίστες). Ενώ τα δοχεία είναι ανοιχτά/επεκτάσιμα και έχουν πρόσβαση μέσω ευρετηρίου, οι συλλογές είναι κλειστές και έχουν μόνο διαδοχική πρόσβαση. Τα σημασιολογικά της RDF επιτυγχάνονται με δύο συνεπαγωγικά συστήματα βασισμένα σε κανόνες, το απλό σύστημα και το RDF. Αυτά τα συστήματα είναι αδύναμα και παρέχουν μόνο λίγους κανόνες για να ερμηνεύσουν τις τριπλέτες ως γράφημα (π.χ. το κατηγορούμενο μιας τριπλέτας ενσωματώνεται ως τύπος ιδιότητας `rdf:Property`), ή ορίζουν τα σημασιολογικά στους κενούς κόμβους (π.χ. ένα υποκείμενο URI μιας τριπλέτας μπορεί να γενικευτεί σε ένα κενό κόμβο). Εκτός από το συντακτικό RDF/XML, που προτείνεται από τους συγγραφείς της RDF για τη χρήση σε εφαρμογές, η RDF μπορεί να σειριοποιηθεί και σε άλλα συντακτικά, π.χ. N-τριπλέτες που απλά καταγράφουν τις άκρες των RDF γραφημάτων, ή την πιο συμπαγή και αναγνώσιμη επέκταση της τη N3.

### Παράδειγμα 1

Ένα RDF γράφημα απεικονίζεται στο Σχήμα 4. Αυτό το γράφημα αντιστοιχεί σε ένα αρχείο RDF, του οποίου η N3 σειριοποίηση απεικονίζεται στο Σχήμα 5 και η RDF/XML στο Σχήμα 6.

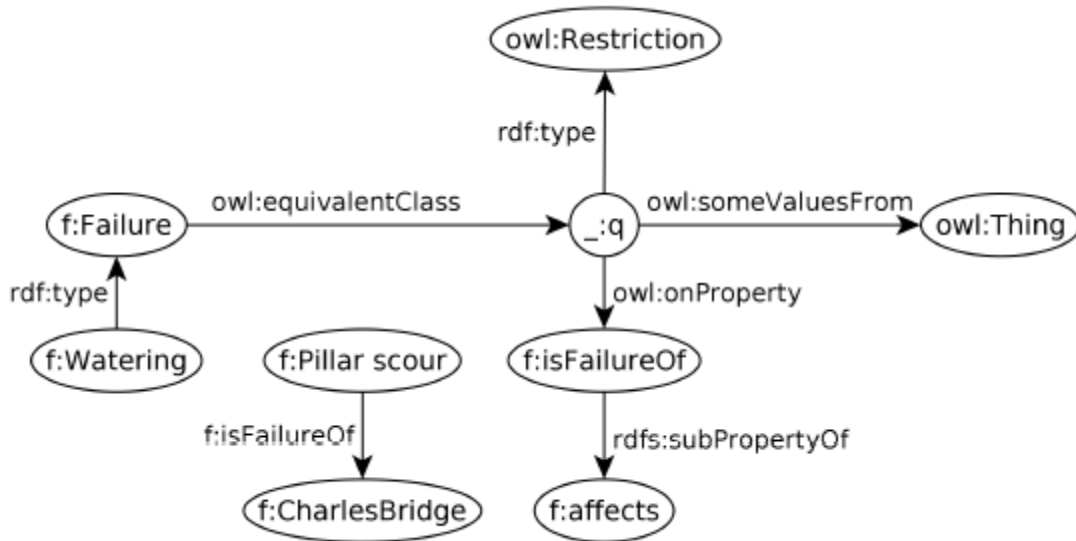
Σημειώνεται ότι ένας πόρος μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε διάφορες θέσεις υποκειμένου/κατηγορουμένου/αντικειμένου σε ένα αρχείο RDF. Στην περίπτωση αυτή το `f:isFailureOf` χρησιμοποιείται και στις τρεις θέσεις ως υποκείμενο, κατηγορούμενο και αντικείμενο. Για να κατανοηθεί το νόημα του γραφήματος, η RDF από μόνη της δεν βοηθάει ιδιαίτερα, καθώς μόνο το κατηγορούμενο `rdf:type` ορίζεται στο λεξικό της. Η τριπλέτα

`f : Watering rdf : type f : Failure`

έχει το νόημα ότι “Watering is a Failure”, δηλαδή ότι η παροχή νερού οδηγεί σε αποτυχία, ενώ η τριπλέτα

`_:q rdf : type owl : Restriction`

Έχει το νόημα ότι υπάρχει πόρος (που αντιπροσωπεύεται από το κενό κόμβο `:q`) του τύπου `owl:Restriction`.



Σχήμα 4. Ένα παράδειγμα γραφήματος RDF. Οι κορυφές (κύκλοι) υποδηλώνουν υποκείμενα και αντικείμενα των τριπλετών, ενώ οι άκρες (βέλη) κατηγορούμενα. Τα URIs των κορυφών και των άκρων συντομογραφούνται χρησιμοποιώντας προθέματα, όπως και στο συντακτικό N3.

```

@prefix f: <http://krizik.felk.cvut.cz/ontologies/2011/example.owl#> .
@prefix owl: <http://www.w3.org/2002/07/owl#> .
@prefix rdf: <http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#> .
@prefix rdfs: <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#> .

f:Failure owl:equivalentClass
    [ rdf:type owl:Restriction ;
      owl:onProperty f:isFailureOf ;
      owl:someValuesFrom owl:Thing ] .
f:isFailureOf rdfs:subPropertyOf f:affects .
f:Watering rdf:type f:Failure .
f:PillarScour f:isFailureOf f:CharlesBridge .

```

Σχήμα 5. Παράδειγμα αρχείου RDF με συντακτικό N3

```

<?xml version="1.0"?>
<!DOCTYPE rdf:RDF [
  <!ENTITY rdf "http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#" >
  <!ENTITY rdfs "http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#" >
  <!ENTITY owl "http://www.w3.org/2002/07/owl#" >
]>
<rdf:RDF xmlns="http://krizik.felk.cvut.cz/ontologies/2011/example.owl#"
  xml:base="http://krizik.felk.cvut.cz/ontologies/2011/example.owl"
  xmlns:rdf="http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#"
  xmlns:rdfs="http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema#"
  xmlns:owl="http://www.w3.org/2002/07/owl#">
  <owl:Class rdf:ID="Failure">
    <owl:equivalentClass>
      <owl:Restriction>
        <owl:onProperty rdf:resource="#isFailureOf"/>
        <owl:someValuesFrom rdf:resource="#&owl;Thing"/>
      </owl:Restriction>
    </owl:equivalentClass>
  </owl:Class>
  <owl:ObjectProperty rdf:ID="isFailureOf">
    <rdfs:subPropertyOf rdf:resource="#affects"/>
  </owl:ObjectProperty>
  <owl:Thing rdf:ID="PillarScour">
    <isFailureOf rdf:resource="#CharlesBridge"/>
  </owl:Thing>
  <Failure rdf:ID="Watering"/>
</rdf:RDF>

```

Σχήμα 6. Παράδειγμα αρχείου RDF με συντακτικό RDF/XML.

Η RDFS είναι μια γλώσσα συστήματος για την RDF που εξυπηρετεί στην ανάπτυξη απλών οντολογιών, περιλαμβάνοντας ορισμούς και ιεραρχίες κλάσεων και ιδιοτήτων (με πολλαπλή κληροδοτικότητα), και ιδιότητες τομέων και εύρους. Το σημασιολογικό μέρος επιτυγχάνεται με αρκετούς ενσωματωμένους κανόνες, που αναφέρονται ως RDFS συστήματα (Patrick Hayes, 2004).

### Παράδειγμα 2

Η RDFS δίνει νόημα στην ιδιότητα της RDF `rdfs : subPropertyOf` στο Σχήμα 4. Η τριπλέτα

`f : isFailureOf rdfs : subPropertyOf f : affects`

δηλώνει ότι αν η ιδιότητα `f : isFailureOf` συνδέει δύο πόρους, τότε αυτοί οι πόροι συνδέονται επίσης με την `f : affects`, καθώς αποτελεί υποιδιότητα της. Επομένως το

σύστημα RDFS επιτρέπει μεταξύ άλλων την ενσωμάτωση της ιδιότητας  $f : affects$  μεταξύ των συνδεδεμένων πόρων

$f : PillarScour$   $f : affects$   $f : CharlesBridge$  .

από το γράφημα του Σχήματος 4.

### 2.6.2. Η γλώσσα OWL

Η γλώσσα OWL αποτελεί κορύφωση μιας παγκόσμιας ερευνητικής προσπάθειας για την καθιέρωση μιας γλώσσας αναπαράστασης γνώσης η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί με συνέπεια στο πλαίσιο του Σημασιολογικού Διαδικτύου. Προτυποποιήθηκε επίσημα το Φεβρουάριο του 2004 από τη W3C (Peter F. Patel-Schneider et al., 2004). Στη συνέχεια το 2009 προτυποποιήθηκε και η OWL 2 (Boris Motik et al., 2009). Η OWL αποτελεί επέκταση της RDFS συμπεριλαμβάνοντας εκφραστικές δομές μοντελοποίησης, όπως λειτουργίες boolean, υπαρξιακές και καθολικές ποσοτικοποιήσεις, αριθμητικούς περιορισμούς και άλλες. Τα αρχικά αντιστοιχούν στη Web Ontology Language ωστόσο προτιμήθηκε, για λόγους ευφωνίας η ονομασία OWL αντί για WOL. Όπως ανέφερε χαρακτηριστικά και ο Guus Schreiber, που ήταν ένας από τους πρωτεργάτες του Web Ontology Working Group, που προτυποποίησε την OWL, «Why not be inconsistent in at least one aspect of a language which is all about consistency?». Πρόκειται για μία γλώσσα της οποίας τα θεμέλια έχουν τεθεί από προαναφερθείσες περιγραφικές λογικές. Με τον τρόπο αυτό υπάρχει η δυνατότητα να χρησιμοποιηθούν υπαρκτοί και υλοποιημένοι αλγόριθμοι για τη συλλογιστική της γλώσσας, εξοικονομώντας έτσι σημαντικούς πόρους.

Οι οντότητες του μοντέλου αναπαριστώνται μέσω των κλάσεων και των μελών. Οι κλάσεις μπορούν να ταξινομηθούν ιεραρχικά, επιτρέποντας έτσι την πολλαπλή κληροδοτικότητα. Μπορούν περαιτέρω να προσδιοριστούν μέσω αξιωμάτων ενσωματωμένων στις κλάσεις που αναφέρονται στην ασυναρτησία κλάσεων, την ισοδυναμία ή την επέκταση της κλάσης. Αυτοί οι βασικοί τύποι αξιωμάτων μπορούν να συνδυαστούν μέσω συνόλων των φορέων ένωσης, διασταύρωσης και συμπληρωματικότητας.

Επιπλέον, η OWL διαθέτει αρχέτυπα για τα γνωρίσματα (‘ιδιότητες τύπου δεδομένων’) και τις δυαδικές σχέσεις (‘ιδιότητες αντικειμένων’). Οι ν-σχέσεις στην OWL πρέπει να εκφραστούν μέσω των κλάσεων. Τα γνωρίσματα και οι σχέσεις μπορούν να ταξινομηθούν ιεραρχικά και η χρήση τους μπορεί να περιοριστεί μέσω περιορισμών για το εύρος και την πληθικότητα. Οι σχέσεις μπορούν να προσδιοριστούν περαιτέρω μέσω αξιωμάτων δηλώνοντας μια σχέση ως μεταβατική, συμμετρική, λειτουργική ή αντιστρόφως λειτουργική (οι τελευταίες δύο ισχύουν και για τα γνωρίσματα). Επιπλέον,

δύο ξεχωριστές σχέσεις μπορούν να δηλωθούν ‘ισοδύναμη με’ ή ‘αντίστροφη από’. Η τμηματοποίηση υποστηρίζεται από το μηχανισμό εισαγωγής της OWL, και επιτρέπει τη συμπερίληψη ορισμών και αξιωμάτων από άλλες οντολογίες στην υπάρχουσα.

Η εν λόγω γλώσσα περιγραφής οντολογιών έχει εμπλουτιστεί όσον αφορά την εκφραστικότητα της σε σύγκριση με τις περιγραφικές λογικές με επιπλέον δυνατότητες. Αναφερόμενοι στην διατυπωμένη από τον Tim Berners-Lee αρχιτεκτονική του Σημαιολογικού Διαδικτύου, η OWL αντιστοιχεί στο λογικό επίπεδο, το οποίο επιτρέπει την επεξεργασία δεδομένων κατώτερου επιπέδου τα οποία πλέον είναι φορτισμένα σημασιολογικά. Οι τρεις διαφορετικές μορφές στις οποίες εμφανίζεται η γλώσσα OWL είναι οι εξής:

- OWL Lite. Προκύπτει από τη γλώσσα περιγραφικής λογικής SHIF(D) και προσφέρει στοιχειώδεις εκφραστικές δυνατότητες σε συνδυασμό όμως με γρήγορες υπολογιστικές επιδόσεις (Deborah L. McGuinness & Frank van Harmelen, 2004).
- OWL DL. Βασίζεται στη γλώσσα περιγραφικής λογικής SHOIN(D), διευρύνοντας σημαντικά την OWL Lite από άποψη εκφραστικότητας. Το υπολογιστικό κόστος που συνοδεύει την εκφραστική επέκταση είναι σημαντικό, ωστόσο πρόκειται για την πιο ευρέως διαδεδομένη γλώσσα περιγραφής οντολογιών (Peter F. Patel-Schneider et al., 2004).
- OWL Full. Πρόκειται για την πλέον εμπλουτισμένη εκφραστικά εκδοχή της γλώσσας της οποίας η OWL DL είναι υποσύνολο. Περιλαμβάνει χαρακτηριστικά της γλώσσας rdf-schema, παραχωρώντας έτσι και περιθώρια μετα-μοντελοποίησης. Οι ανεξέλεγκτες όμως αυτές εκφραστικές δυνατότητες την καθιστούν μη-αποφασίσιμη και κατ’επέκταση μη χρησιμοποιήσιμη σε εφαρμογές (Ian Horrocks, 2005).

## 2.7. Γλώσσα ερωτήσεων SPARQL

Η αξιοποίηση των οντολογιών και των δομών τους, απαιτεί τη χρήση μιας γλώσσας ερωτήσεων για την ανάκτηση των πληροφοριών που εμπεριέχει επιλεκτικά και έξυπνα. Για τις οντολογίες RDF, αρκετές γλώσσες ερωτήσεων εμφανίστηκαν τη τελευταία δεκαετία, αλλά μία μόνο επικράτησε, η SPARQL (Σχήμα 7) η οποία προτυποποιήθηκε το 2008 από τη W3C (Eric Prud’hommeaux & Andy Seaborne, 2008)

```
PREFIX: <http://krizik.felk.cvut.cz/ontologies/2009/failures.owl#>
```

```
SELECT ?x WHERE {?x :affects _:y .}
```

Σχήμα 7. Απλή ερώτηση SPARQL για την οντολογία του παραδείγματος 1. Η ερώτηση ρωτάει για όλα τα μέλη («failures») που επηρεάζουν κάτι (κάποιο αντικείμενο).

Η SPARQL 1.1 προτυποποιήθηκε το 2012 και επεκτείνεται με προχωρημένες δομές, όπως λειτουργίες συνόλων, εκφράσεις διαδρομών, υπο-ερωτήματα, αναιρέσεις, προχωρημένες εκφράσεις στις επιλογές και άλλα (Steve Harris & Andy Seaborne, 2012). Ένα βασικό SPARQL ερώτημα συντίθεται χρησιμοποιώντας βασικά μοτίβα γραφήματος, δηλαδή γενικοποιημένα RDF γραφήματα που περιέχουν εκτός από URIs, κενούς κόμβους, λεκτικά σύνολα και μεταβλητές. Τα βασικά μοτίβα γραφήματος μπορούν να συνδυαστούν σε πολύπλοκα μοτίβα χρησιμοποιώντας αλγεβρικούς χειριστές, όπως την ένωση δύο σχέσεων («UNION»), την προαιρετικότητα («OPTIONAL»), ή το φιλτράρισμα σειρών σχέσεων («FILTER»). Τα βασικά σύνολα αποτελεσμάτων ενός SPARQL μοτίβου είναι μια σχέση (πίνακας), στην οποία μπορούν άμεσα να τοποθετηθούν τα αποτελέσματα (τύπος ερώτησης «SELECT»), ή να μετασχηματιστούν σε ένα γράφημα RDF (τύπος ερώτησης «CONSTRUCT»), ή να εκφραστούν μέσω boolean για το αν το αποτέλεσμα της ερώτησης είναι αληθές ή λάθος (τύπος ερώτησης «ASK»). Παρακάτω, δίνεται ένα επεξηγηματικό παράδειγμα ενός ερωτήματος SPARQL.

#### Παράδειγμα 4

Το ερώτημα του παραπάνω σχήματος περιέχει μια μεταβλητή ?x που μπορεί να ταυτοποιήσει πόρους URIs και μια μεταβλητή κενού κόμβου :y, που μπορεί να ταυτοποιήσει την ύπαρξη οποιουδήποτε πόρου που είναι ενσωματωμένος στο γράφημα RDF. Τα αποτελέσματα του ερωτήματος διαφοροποιούνται ανάλογα με το σύστημα που χρησιμοποιείται για την αξιολόγηση του. Οι προδιαγραφές του SPARQL επιτρέπουν τη χρήση συστημάτων RDF, RDFS, και OWL DL παρόμοια με τις διαφορετικές ερμηνείες των γραφημάτων RDF που απεικονίζονται στα Παραδείγματα 1,2 και 3. Ως αποτέλεσμα:

- Όταν αξιολογείται το ερώτημα χρησιμοποιώντας το σύστημα RDF δεν επιστρέφεται κάποιο αποτέλεσμα για τη μεταβλητή ?x.
- Όταν αξιολογείται το ερώτημα χρησιμοποιώντας το σύστημα RDFS, ένα μόνο αποτέλεσμα επιστρέφεται το f : PillarScour.

- Όταν αξιολογείται το ερώτημα χρησιμοποιώντας το σύστημα OWL DL, δύο αποτελέσματα επιστρέφονται τα : f : PillarScour και f : Watering.

## 2.8. Οι οντολογίες στα Συστήματα Πληροφοριών

Η ιδέα χρήσης οντολογιών σημασιολογικού διαδικτύου ως πηγές δεδομένων για συστήματα πληροφοριών, έχει συζητηθεί από τη κοινότητα σημασιολογικού διαδικτύου εδώ και αρκετά χρόνια (Holger Knublauch et al., 2006). Οι οντολογίες RDFS ή OWL θεωρούνται ικανές για την αναπαράσταση μοντέλων τομέα για συστήματα OIS («Ontology-based Information System»), που σχεδιάζονται συνήθως με τις αρχές του αντικειμενοφόρου προγραμματισμού και εφαρμόζεται με αντικειμενοφόρες γλώσσες, όπως η Java, C# ή Python. Τα συστήματα αυτά επωφελούνται από τις οντολογίες λόγω της:

- Επαναληψιμότητα χρήσης και , καθώς τα μοντέλα RDF και OWL μπορούν να διαμοιραστούν μεταξύ των εφαρμογών και στο διαδίκτυο.
- Ευελιξίας και διαλειτουργικότητας, καθώς τα τα μοντέλα RDF και OWL μπορούν να λειτουργήσουν σε ένα ανοιχτό περιβάλλον στο οποίο οι κλάσεις ορίζονται δυναμικά.
- Συνέπειας και ποιότητας ελέγχου μεταξύ των μοντέλων
- Συλλογιστικής, καθώς η OWL έχει πλούσια εκφραστικότητα που υποστηρίζεται από αυτοματοποιημένα εργαλεία αιτιολόγησης.

Παρόλο που αυτές οι αρχές είναι ξεκάθαρα συμφέρουσες για το σχεδιασμό και τη λειτουργία πληροφοριακών συστημάτων, η διαδικασία της εφαρμογής τους προέκυψε αρκετά αργή. Τα περισσότερα προβλήματα προέρχονται από τη σημασιολογική ασυμβατότητα των αντικειμενοφόρων μοντέλων και των οντολογιών OWL. Η σημασιολογική σύγκρουση μεταξύ του OWA («Open World Assumptions») των οντολογιών σημασιολογικού διαδικτύου και του CWA («Closed World Assumptions») των αντικειμενοφόρων μοντέλων, δημιουργεί αρκετά προβλήματα στην εφαρμογή των παραπάνω απαιτήσεων.

### 2.8.1. Αρχιτεκτονική Οντολογικών Πληροφοριακών Συστημάτων

Ανιχνεύονται 4 ευρέως αποδεκτές φάσεις κύκλου ζωής στην οντολογική μηχανική (ανάλυση απαιτήσεων, ανάπτυξη, ενσωμάτωση, αξιολόγηση) και ακολούθως οι χρήσεις της οντολογίας (καταγραφή, κάθαρση, συγχώνευση, αναζήτηση & ανάκτηση & αιτιολόγηση). Με βάση αυτό το οντολογικό μοντέλο εξέλιξης, προτείνεται μια γενικευμένη τμηματοποιημένη αρχιτεκτονική ενός συστήματος OIS, που περιγράφεται

από το Σχήμα (Thanh Tran et al., 2007). Η αρχιτεκτονική αυτή είναι μια γενικοποίηση του οντολογικού πλαισίου NeON Toolkit (NeON Project, 2006), ένα περιβάλλον οντολογικής μηχανικής που αναπτύχθηκε στο FP6 Ευρωπαϊκό έργο NeON (IST-2005-027595). Παρόλο που αυτό το πλαίσιο δεν παρέχει ενοποιημένη μεθοδολογία για τον αρχιτεκτονικό σχεδιασμό, είναι κατανοητό από την άποψη των λειτουργιών που παρέχονται από το σύστημα OIS. Η αρχιτεκτονική του έχει τα ακόλουθα συστατικά τμήματα:

- **Τμήμα παρουσίασης**, που περιέχει συστατικά μιας προηγμένης επιφάνειας χρήστη (UI – User Interface) για την αναπαράσταση του οντολογικού περιεχομένου.
- **Τμήμα λογικής** που παρέχει οντολογικές λειτουργίες υψηλού επιπέδου για την οντολογική μηχανική και τη χρήση των φάσεων κύκλου ζωής των οντολογιών.
- **Τμήμα δεδομένων**, που αντλεί δεδομένα από διάφορες πηγές.

Ένα πληροφοριακό σύστημα μπορεί να χρειάζεται μόνο κάποια από αυτά τα συστατικά της αρχιτεκτονικής (Σχήμα 8). Για παράδειγμα οι επεξεργαστές οντολογιών, όπως ο Protégé χρησιμοποιούν βαριές λειτουργίες οντολογικής μηχανικής και συνήθως καθόλου λειτουργίες χρήσης των οντολογιών. Η αρχιτεκτονική μπορεί να θεμελιωθεί με διαφορετικούς τρόπους (Thanh Tran et al., 2007). Μπορεί να πρόκειται για ένα πλούσιο σύστημα που ενσωματώνει τα πάντα, ή να είναι μια αυστηρά συζευγμένη πολυεπίπεδη αρχιτεκτονική Java EE προσανατολισμένη ως προς τα συστατικά της, ή μια χαλαρά συζευγμένη αρχιτεκτονική SOA (Service Oriented Architecture). Η πολυεπίπεδη αρχιτεκτονική Java EE απεικονίζεται με ένα διαδυσκτακό πληροφοριακό σύστημα, που βασίζεται στο NeON Toolkit.

Οι αρχιτεκτονικές OIS μπορούν να ταξινομηθούν ως γενικευμένες αρχιτεκτονικές (δηλαδή ανεξάρτητες από οντολογίες) και ως αρχιτεκτονικές στοχευμένες σε κάποιο τομέα (δηλαδή εξαρτώμενες από οντολογίες). Αυτή η διάκριση επηρεάζει σημαντικά το πως το σύστημα OIS θα ανταποκριθεί στις αλλαγές των οντολογιών. Ενώ τα συστήματα με γενικευμένη αρχιτεκτονική δεν εξαρτώνται από την εξεταζόμενη οντολογία και επομένως οι αλλαγές σε αυτή δεν θα επηρεάσουν τη λειτουργία του, τα συστήματα με στοχευμένη ως προς το τομέα αρχιτεκτονική εξαρτώνται (μερικώς) από την οντολογία και επομένως αλλαγές σε αυτή κατά τη διάρκεια εκτέλεσης του OIS μπορεί να προκαλέσει σφάλματα στο σύστημα. Στη συνέχεια θα επικεντρωθούμε στην πρόσβαση των οντολογιών OWL μέσω συστημάτων, καθώς η διπλωματική αυτή χρησιμοποιεί τη συγκεκριμένη μορφή οντολογιών.

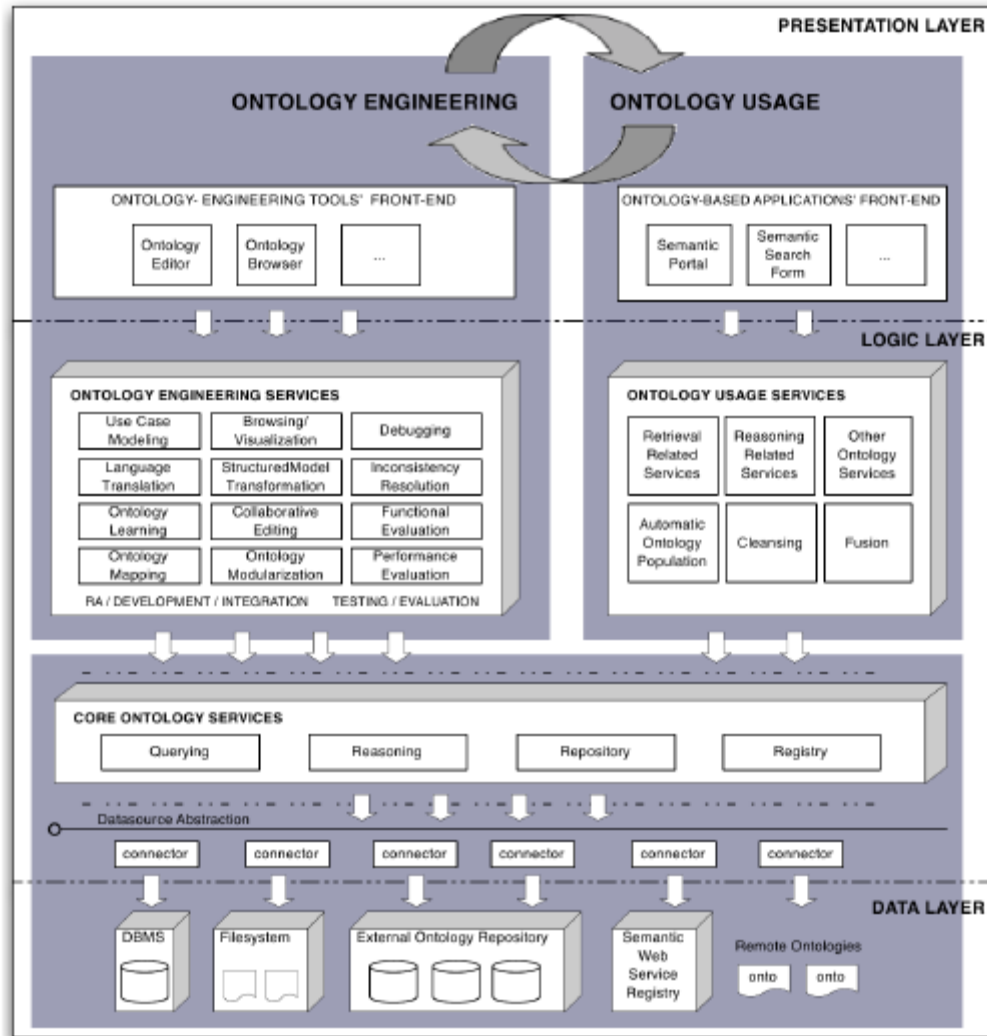


### 2.8.1.1. Συστήματα με γενικευμένη αρχιτεκτονική

Τα συστήματα αυτού του κεφαλαίου μπορούν να έχουν διάφορες χρήσεις, αλλά η αρχιτεκτονική τους δεν εξαρτάται από μια συγκεκριμένη οντολογία στο χρόνο σύνθεσης τους. Η αρχιτεκτονική τους (δηλαδή το τμήμα παρουσίασης, λογικής και δεδομένων) είναι αρκετά γενικευμένο ώστε να έχει πρόσβαση σε αυθαίρετες οντολογίες (στη δεδομένη γλώσσα οντολογίας, δηλαδή στην περίπτωση αυτή την RDFS/OWL). Τέτοια συστήματα αποτελούν οι:

- Επεξεργαστές οντολογιών, που στοχεύουν στη δημιουργία, επεξεργασία και εξερεύνηση των οντολογιών. Παραδείγματα επεξεργαστών είναι οι Protégé (Stanford Center for Biomedical Informatics Research), NeON Toolkit (NeON Project, 2006), TopBraid Composer (TopBraid Composer), SWOOP (Aditya Kalyanpur et al., 2005) και άλλοι.
- Συστήματα με συγκεκριμένο σκοπό που κατασκευάζονται για συγκεκριμένα σενάρια των χρηστών, και παραμένουν ανεξάρτητα από κάποια οντολογία. Παραδείγματα τέτοιων σεναρίων είναι η σημασιολογική αναζήτηση (π.χ. SWOOGLE (Tim Finin et al., 2004), ένα ευρετήριο και σύστημα ανάκτησης για σημασιολογικά αρχεία διαδικτύου), σημασιολογικοί σχολιασμοί πόρων του διαδικτύου (διάφορα plug-ins προγραμμάτων περιήγησης, π.χ. SemanticTurkey (Donato Griesi et al., 2007) για τον Mozilla Firefox (Mozilla Firefox Homepage)) ή semantic wikis (π.χ. IkeWiki (Sebastian Schaffert, 2006)).
- Συστήματα στοχευμένα ως προς την οντολογία, των οποίων τα επιχειρηματικά συστατικά και η λογική της επιφάνειας χρήστη περιγράφεται πλήρως στις οντολογίες, υπακούοντας τις αρχές τις «Model-Driven Architecture» (MDA) (David Frankel, 2002). Τότε αυτά αναπαράγονται ((Lv an Tang et al., 2006), (Mauri Leppanen, 2008)) στο χρόνο εκτέλεσης με βάση τις οντολογικές περιγραφές ((Rosemary Shrestha et al., 2010), (Amit Sheth & Cartic Ramakrishnan, 2003)).

Στην παρούσα διπλωματική αναπτύσσονται γενικευμένα συστήματα μέσω επεξεργαστή οντολογίας. Συγκεκριμένα χρησιμοποιείται ο επεξεργαστής Protégé έκδοσης 4.3 για τη δημιουργία οντολογιών OWL 2.



Σχήμα 8. Σύστημα αρχιτεκτονικής οντολογιών (Thanh Tran et al., 2007).

### 2.8.1.2. Συστήματα με αρχιτεκτονική στοχευμένη ως προς το τομέα

Τα συστήματα με αρχιτεκτονική στοχευμένη ως προς το τομέα εξαρτώνται από τη δομή της οντολογίας στο χρόνο εκτέλεσης τους. Αυτά τα συστήματα δεν είναι κατευθυνόμενα οντολογικά καθώς χρειάζονται πολύπλοκη επιχειρηματική λογική (π.χ. πολύπλοκους υπολογισμούς) ή ανεπτυγμένες επιφάνειες χρήστη (UI) για το συγκεκριμένο οντολογικό τομέα που μας ενδιαφέρει, πράγμα που θα ήταν δύσκολο αν όχι αδύνατο να εκφραστεί μέσω των οντολογιών σημασιολογικού διαδικτύου. Η επιχειρηματική και UI λογική τότε αναπαριστώνται με ένα αντικείμενο μοντέλο και τη διαδικαστική λογική του. Η εξάρτηση του πληροφοριακού συστήματος από την οντολογία υλοποιείται μέσω

χαρτογράφησης αντικειμένου-οντολογίας (OOM - Object-Ontology Mapping). Παραδείγματα τέτοιων συστημάτων είναι το πληροφοριακό σύστημα υγείας (η UI λογική εφαρμόζεται σε μορφή Microsoft Access που αντικατοπτρίζει τις κλάσεις και ιδιότητες της οντολογίας) (Craig E. Kuziemsky & Francis Lau, 2010), το e-shop με λαπτοπ (αναπαραγόμενα PHP scripts βασισμένα στις κλάσεις και ιδιότητες των οντολογιών) (Moein Mehrolhassani & Atilla Elci, 2008), ή τη σημασιολογική επιφάνεια εργασίας Neromuk (αναπαραγόμενο αντικείμενο μοντέλο μέσω Java για μια οντολογία έργου, χρησιμοποιώντας RDFReactor (Max Volkel, 2006)) (Gunnar A. Grimnes et al., 2009).

## 2.8.2. Πρόσβαση στις οντολογίες OWL προγραμματιστικά

Έχουν προταθεί αρκετές προσεγγίσεις για την εφαρμογή των αρχιτεκτονικών συστημάτων που παρουσιάστηκαν προηγουμένως. Παρόλο που υπάρχουν προσεγγίσεις για προγραμματιστική πρόσβαση στις οντολογίες σε διάφορες γλώσσες (Perl (Edward Kawas & Mark D. Wilkinson, 2010), Python (SurfRDF), PHP (RDFAPI), ActiveRDF για Ruby (Eyal Oren, 2011)), οι περισσότερες από τις προσεγγίσεις πλέον δομούνται στη Java, λόγω της επιτυχίας της στη κοινότητα σημασιολογικού διαδικτύου. Οι προσεγγίσεις κατηγοριοποιούνται ως (i) χαμηλού επιπέδου (τύπος 1) ή (ii) υψηλού επιπέδου (τύπος 2), ανάλογα με το τύπο άντλησης του αντικειμένου-μοντέλου. Ο τύπος 1 είναι γενικευμένος, το αντικείμενο μοντέλο είναι ανεξάρτητο από τη συγκεκριμένη οντολογία, αλλά η προγραμματιστική χρήση είναι λεπτομερής. Από την άλλη μεριά, ο τύπος 2 προσεγγίζει μέρος της οντολογίας στο αντικείμενο μοντέλο, δημιουργώντας εξάρτηση από την οντολογία και συμβατή πρόσβαση της εφαρμογής.

### 2.8.2.1. Διεπαφή Προγραμματισμού Εφαρμογών (APIs) Τύπου 1

Εκπρόσωποι των APIs τύπου 1 για την πρόσβαση στις οντολογίες OWL από τη Java θεωρούνται δύο διαδεδομένες βιβλιοθήκες ανοιχτού κώδικα η OWLAPI (Matthew Horridge & Sean Bechhofer, 2011) και η Jena (Jeremy J. Carroll et al., 2004).

Η **OWLAPI** (αρχικά ονομαζόταν WonderWeb API) αναπτύχθηκε από το Πανεπιστήμιο του Manchester πριν 12 χρόνια περίπου. Οι εκδόσεις 2.x του API στόχευαν στην πρόσβαση στις οντολογίες OWL. Από το 2007, οι προγραμματιστές ξεκίνησαν να εφαρμόζουν τα χαρακτηριστικά της OWL 2. Εν τέλει, η OWLAPI 3 έγινε μία από τις εφαρμογές αναφοράς για τη σειρά OWL 2 των W3C recommendations, που κυκλοφόρησε το 2009. Διαθέτει (i) μεταμοντέλο OWL 2 που είναι άμεση εφαρμογή του προτυποποιημένου λειτουργικού συντακτικού (Boris Motik et al., 2009), (ii) API για βασικές λειτουργίες αιτιολόγησης, π.χ. έλεγχος συνέπειας ή απάντηση ερωτημάτων, και (iii) API για προηγμένες λειτουργίες οντολογιών, π.χ. αιτιολογήσεις αξιωμάτων, ή

αποθήκευση στην OWL. Σήμερα, η OWLAPI είναι ένα κλασσικό API για την πρόσβαση οντολογιών OWL και OWL 2 μέσω της Java.

Η **Jena** αναπτύχθηκε από την HP Labs Semantic Web Programme πριν από περίπου 12 χρόνια. Παρόλο που αρχικά στόχευε στην προγραμματιστική πρόσβαση των οντολογιών RDF, RDFS και OWL μέσω της Java, πλέον είναι αρκετά ευρύτερη συμπεριλαμβάνοντας και την επεξεργασία των SPARQL (ARQ), μηχανισμούς αποθήκευσης (TDB, SDB) και άλλες επεκτάσεις.

Η χρήση APIs του τύπου 1 είναι χρήσιμη για την ανάπτυξη γενικευμένων συστημάτων. Παρόλαυτα, η χρήση τους για στοχευμένα συστήματα ως προς τις εφαρμογές είναι χρονοβόρα και επιρρεπής σε λάθη, καθώς ο προγραμματιστής της εφαρμογής αναγκάζεται να παράγει πολλά κομμάτια παρόμοιου κώδικα για την έκφραση της λογικής που είναι εξαρτώμενη από το τομέα. Η λεπτομέρεια καταγραφής των APIs χαμηλού επιπέδου επίσης μετατρέπει τον πηγαίο κώδικα των εφαρμογών πολύπλοκο και δύσκολα διατηρήσιμο.

Στην παρούσα διπλωματική, επειδή στοχεύουμε στην δημιουργία ενός γενικευμένου συστήματος οντολογιών χρησιμοποιείται ο τύπος 1 και συγκεκριμένα η βιβλιοθήκη Jena για την πρόσβαση στις οντολογίες OWL 2.

### **2.8.2.2. Διεπαφή Προγραμματισμού Εφαρμογών (APIs) Τύπου 2**

Για αρχιτεκτονικές που στοχεύουν στην περιγραφή κάποιου τομέα, η λεπτομερής καταγραφή του τύπου 1 ήταν η αφορμή για την πρόταση της κοινότητας του σημασιολογικού διαδικτύου σχετικά με αντιστοιχίσεις αντ χοκ (τελικού αιτίου, «ad-hoc») ανάμεσα στο αντικείμενο μοντέλο και την οντολογία OWL, συχνά χωρίς να κατανοούν τα σημασιολογικά των επιλογών μοντελοποίησης τους. Εφαρμογές αυτών των αντιστοιχίσεων συνήθως είναι ικανές να δημιουργήσουν APIs τύπου 2, που είναι εύκολα στη χρήση από τους προγραμματιστές των εφαρμογών, παρόλο που απαιτήτων παρέχουν μια πιο απλοποιημένη οπτική των οντολογιών. APIs για την RDF όπως Sommer (H. Story. Semantic Object (Metadata) Mapper), Winter (Carsten Saathoff et al., 2009), Elmo (Peter Mika & James Leigh, 2006), RDFReactor (Max Volkel, 2003), ή RDF2Java (RDF2Java) χρησιμοποιούν αντικειμενοφόρες αντιστοιχίσεις οντολογιών (OOM) για την αντιστοίχιση των κλάσεων της RDFS με αυτές της Java και τις ιδιότητες της RDF με τις αντίστοιχες της Java σύμφωνα με μια αντ χοκ χαρτογράφηση. Οι ικανότητες για ερωτήσεις αυτών των APIs είναι περιορισμένες. Δεν αναλύονται περαιτέρω καθώς ο τύπος αυτός δεν χρησιμοποιείται στην μεθοδολογία της παρούσας διπλωματικής.

## 2.9. Η έννοια του Βιοδυλιστηρίου

Για την καλύτερη κατανόηση της σύνθεσης στα βιοδυλιστήρια στην παρούσα ενότητα, αναλύονται οι βασικές έννοιες του, οι ορισμοί του και τα χαρακτηριστικά της ενσωματωμένης βιοδιύλισης.

### 2.9.1. Επισκόπηση

Πολλοί συγγραφείς ορίζουν την έννοια του βιοδυλιστηρίου ως μια αναλογία των δυλιστηρίων πετρελαίου. Η κύρια διαφορά έγκειται στη κατανομή της πρώτης ύλης και στις δυνατότητες της βιομάζας να κλασματοποιείται σε μια οικογένεια προϊόντων (Moncada J et al., 2012). Ανάλογα με τη φυσική και χημική φύση της πρώτης ύλης καθώς και το οικονομικό ενδιαφέρον, οι αποδόσεις και οι κατανομές της διαφέρουν αισθητά. Βιώσιμα βιοδυλιστήρια με πολλά προϊόντα πρέπει να επικεντρώνονται στα τμήματα της βιομάζας που παράγουν πολλαπλά προϊόντα ενσωματωμένα σε μια μονάδα. Παρόλαυτα, υπάρχουν αρκετές απόψεις για της επιλογές βιοδιύλισης με αποτέλεσμα την ύπαρξη διαφορετικών ορισμών και θέσεων. Παρακάτω εξηγείται εν συντομία διάφορες αντιλήψεις για την έννοια του βιοδυλιστηρίου όπως παρουσιάζονται στη βιβλιογραφία.

### 2.9.2. Η έννοια του βιοδυλιστηρίου: Συζήτηση σχετικά με τους ορισμούς της βιβλιογραφίας

Τα τελευταία χρόνια πραγματοποιούνται όλο και περισσότερες κινήσεις με στόχο την αύξηση της χρήσης των ανανεώσιμων πηγών (πιο βιώσιμη οικονομία) ώστε να επιτευχθεί μείωση της εξάρτησης της οικονομίας από τα ορυκτά καύσιμα. Η μετατροπή αυτή σε μια βιο-οικονομία οφείλεται σε πολλούς λόγους. Σε πολλές χώρες η υπερβολική εξάρτηση από τα ορυκτά καύσιμα δημιουργεί θέματα κλιματικής αλλαγής, αυξάνοντας έτσι την επιθυμία για μείωση των αερίων του θερμοκηπίου. Παράλληλα εντείνεται η ανάγκη για έπαρση της περιφερειακής ανάπτυξης (IEA, 2012). Τα προϊόντα που βασίζονται σε βιο-πόρους μπορούν να ανακτηθούν μέσω μίας μονής διεργασίας. Παρόλαυτα, η ενσωματωμένη παραγωγή χημικών, υλικών, ενέργειας και φαγητού είναι πιθανότατα πιο αποτελεσματική προσέγγιση για τη βιώσιμη αξιοποίηση των πόρων βιομάζας στις μελλοντικές βιοοικονομίες (Posada JA et al., 2012), (Stoeglehner G & Narodoslawsky M, 2009), (Demirbas A, 2009)).

Σύμφωνα με τον Huang et al. (2008) το βιοδυλιστήριο ορίζεται εκείνο που χρησιμοποιεί βιοπόρους όπως βιομάζα από καλλιέργειες ή δάση για την παραγωγή ενέργειας και ενός μεγάλου εύρους πρόδρομων χημικών και βιολικών, παρόμοια με εκείνα των σύγχρονων δυλιστηρίων πετρελαίου. Χημικά βιομηχανικής πλατφόρμας όπως οξικό οξύ, υγρά καύσιμα όπως βιοαιθανόλη και βιοαποικοδομήσιμα πλαστικά όπως

πολυδροξυλοαλκανοικά παράγωγα μπορούν να παραχθούν από το ξύλο και άλλες μορφές λιγνοκυτταρινούχας βιομάζας.

Το βιοδιυλιστήριο είναι ένα πολύπλοκο σύστημα όπου η βιομάζα επεξεργάζεται για την παραγωγή ενέργειας, βιοκαυσίμων και προϊόντων υψηλής αξίας. Αυτή η έννοια μπορεί να συγκριθεί με την υπάρχουσα έννοια των συμβατικών διυλιστηρίων, όπου οι διεργασίες βασίζονται στην κλασματοποίηση ενός σύνθετου μίγματος. Παρόλ αυτά, υπάρχουν δύο στοιχεία που κάνουν τη διαφορά. Πρώτον η πρώτη ύλη, διότι αυτή που χρησιμοποιείται στα βιοδιυλιστήρια δεν έχει υποστεί τη βιοαποικοδόμηση του αργού πετρελαίου με την πάροδο των χρόνων. Οπότε οι πιθανότητες απόκτησης περισσότερων προϊόντων είναι μεγαλύτερες με τη χρήση βιομάζας. Η δεύτερη διαφορά είναι η εφαρμογή διαφορετικών υπάρχουσων και αναδυόμενων τεχνολογιών για την απόκτηση των βιοπροϊόντων. Επιπλέον, η βιοδιύλιση περιλαμβάνει την εκτίμηση και χρήση μεγάλου εύρους τεχνολογιών για το διαχωρισμό της βιομάζας στα κύρια συστατικά της (υδατάνθρακες, πρωτεΐνες, τριγλυκερίδια κτλ), που μετατρέπονται ακολούθως σε προϊόντα προστιθέμενης αξίας. Η παλέτα των προϊόντων από ένα βιοδιυλιστήριο περιλαμβάνει εκτός από τα προϊόντα των συμβατικών διυλιστηρίων, και πρόσθετα που δεν περιέχονται στα συμβατικά. Τα βιοδιυλιστήρια μπορούν να παράγουν ενέργεια υπό μορφή θερμότητας ή βιοκαυσίμων, ουσίες με εφαρμογές στη χημεία, τα καλλυντικά ή και την ιατρική, υλικά όπως πλαστικά και πηγές φαγητού για ανθρώπους και ζώα ((Liu S et al., 2012), (Fatih Demirbas M., 2009), (Demirbas A., 2010), (Pham V. et al., 2011), (Cherubini F, 2010)).

Επιπλέον των προαναφερθείσων εννοιών, ο Clark (Clark, 2007) προτείνει τον ακόλουθο ορισμό: «Το βιοδιυλιστήριο είναι μια έννοια μετατροπής φυτικής βιομάζας σε χημικά, ενέργεια και υλικά που χρησιμοποιούνται στον πολιτισμό μας, αντικαθιστώντας τις ανάγκες του πετρελαίου, του κάρβουνου, του φυσικού αερίου και άλλων μη ανανεώσιμων χημικών και ενεργειακών πηγών. Η βιομάζα είναι ανανεώσιμη, όπως τα φυτά συνθέτουν χημικά αντλώντας ενέργεια από τον ήλιο και διοξείδιο του άνθρακα και νερό από το περιβάλλον, απελευθερώνοντας οξυγόνο. Αυτή η διεργασία ή κύκλος συνεχίζεται χωρίς ανθρώπινη παρέμβαση. Η καύση της βιομάζας απελευθερώνει ενέργεια, διοξείδιο του άνθρακα και νερό. Η ανανεώσιμη συγκομιδή και χρήση της βιομάζας δεν επιδρά αρνητικά στο περιβάλλον και είναι ουδέτερη ως προς τον άνθρακα. Επομένως, το βιοδιυλιστήριο διαδραματίζει σημαντικό ρόλο στη διαβεβαίωση ότι ο κύκλος παραγωγής και κατανάλωσης της βιομάζας ικανοποιεί τις ανθρώπινες ανάγκες για ενέργεια και χημικά. Η έννοια του βιοδιυλιστηρίου είναι ανάλογη του διυλιστηρίου πετρελαίου. Τα συμβατικά διυλιστήρια παίρνουν το πετρέλαιο και κλασματοποιούν όλες τις πιθανές πρώτες ύλες για περαιτέρω επεξεργασία και ανάμειξη για την παραγωγή μιας μεγάλης συστοιχίας ορυκτών καυσίμων που χρησιμοποιούνται σήμερα.»

Επίσης, το Αμερικάνικο Τμήμα Ενέργειας (DOE) χρησιμοποιεί τον ακόλουθο ορισμό: «Το βιοδυλιστήριο είναι η γενική έννοια μιας μονάδας επεξεργασίας όπου η βιομάζα ως πρώτη ύλη μετατρέπεται και εξάγεται σε ένα φάσμα χρήσιμων προϊόντων, βασισμένη στο πετροχημικό δυλιστήριο». Εκτός των άλλων, το Εθνικό Αμερικάνικο Εργαστήριο Ανανεώσιμης Ενέργειας (NREL) δημοσίευσε τον εξής ορισμό: « Το βιοδυλιστήριο είναι μια εγκατάσταση που ενσωματώνει τις διεργασίες μετατροπής της βιομάζας και του εξοπλισμού για την παραγωγή καυσίμων, ενέργειας και χημικών από τη βιομάζα. Η έννοια του βιοδυλιστηρίου είναι ανάλογη του σημερινού δυλιστηρίου πετρελαίου, που παράγει πολλαπλά καύσιμα και προϊόντα από το πετρέλαιο. Τα βιομηχανικά βιοδυλιστήρια έχουν αναγνωριστεί ως την πιο υποσχόμενη επιλογή για τη δημιουργία μιας καινούργιας βιο-βιομηχανίας» (Kamm B et al., 2008).

### **2.9.3. Ενσωματωμένο Βιοδυλιστήριο**

Διαφοροποιώντας προϊόντα καθώς και τις προμήθειες των πρώτων υλών, το ενσωματωμένο βιοδυλιστήριο θεωρείται ως μια ευέλικτη κατασκευαστική διεργασία με στόχο την παροχή μιας βιώσιμης τροφοδοσίας προϊόντων όπως βιοκαύσιμα, χημικά, υδρογόνο, και ηλεκτρισμό (Yun et al, 2009; Werpy et al, 2004). Συνδυάζοντας τις θερμοχημικές και βιοχημικές τεχνολογίες μετατροπής, επιτυγχάνεται μεγαλύτερη ευελιξία στην παραγωγή προϊόντων καθώς και μικρότερο συνολικό κόστος μέσω της προσέγγισης του ενσωματωμένου δυλιστηρίου (Naik et al, 2010). Λόγω της ικανότητας τους να παράγουν ένα μεγάλο κατάλογο προϊόντων από διάφορες πηγές, η ενσωματωμένη βιοδυλίση θεωρείται ως μια κατάλληλη πλατφόρμα για την παραγωγή βιοπροϊόντων από λιγνοκυτταρινούχα (Huang et al, 2009) χάρη στην προυπάρχουσα υποδομή καθώς και το συνδυασμό λιγνοκυτταρινούχων πόρων με συμβατικούς πόρους ορυκτών καυσίμων όπως το κάρβουνο και το φυσικό αέριο (Baliban et al, 2011). Έχουν γίνει απόπειρες για τη βελτιστοποίηση των μονοπατιών βιομάζας-προϊόντων χρησιμοποιώντας την προσέγγιση του ενσωματωμένου βιοδυλιστηρίου (Huang et al, 2009; Tay et al, 2011). Για την πλήρη αξιοποίηση των δυνατοτήτων του ενσωματωμένου βιοδυλιστηρίου, στρατηγικές, τακτικές και λειτουργικές αποφάσεις στην αλυσίδα τροφοδοσίας πρέπει να συνδυαστούν με αντίστοιχες αποφάσεις επεξεργασίας, από την προμήθεια των πρώτων υλών μέχρι τη κατανομή των προϊόντων στην αγορά. Όταν συνδυάζονται τέτοιες αποφάσεις σε ένα ενιαίο μοντέλο, η πολυπλοκότητα αυξάνεται εκθετικά. Για να καλυφθούν και τα δύο επίπεδα απόφασης, η μοντελοποίηση της αλυσίδας τροφοδοσίας ενός ενσωματωμένου βιοδυλιστηρίου πρέπει να σπάσει σε δύο μοντέλα: (1) στην αλυσίδα τροφοδοσίας και (2) στη διεργασία. Η συνεργασία και επικοινωνία μεταξύ των δύο μοντέλων πρέπει να είναι εφικτή επαρκώς για να ενσωματωθεί το στρατηγικό, τακτικό και λειτουργικό επίπεδο απόφασης στο σχεδιασμό της αλυσίδας τροφοδοσίας ενός ενσωματωμένου βιοδυλιστηρίου.

---

## **ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ**

---



### 3. Μεθοδολογία

Η μεθοδολογία που παρουσιάζεται αφορά κυρίως την αυτοματοποίηση της σύνθεσης υπερδομών ώστε να προκύπτουν επιμέρους δομές επιλεκτικά ανάλογα με τα δεδομένα του προβλήματος. Οι υπερδομές στη Χημική Μηχανική αποτελούν πολύπλοκα δίκτυα που αποτελούνται από πρώτες ύλες, ενδιάμεσα χημικά, τελικά προϊόντα, τεχνολογίες. Παράλληλα, τα συστατικά αυτά των δικτύων κρύβουν από πίσω γνώσεις, μοντέλα, δεδομένα που είναι απαραίτητα για την επίλυση προβλημάτων.

Η μεθοδολογία που παρουσιάζεται μπορεί να συμπυκνωθεί στα εξής βήματα:

- I. Η αφαιρετική σύλληψη του τομέα, όπου η γνώση του τομέα αναλύεται σε έννοιες που στη συνέχεια συνδυάζονται με σχέσεις για την επίλυση προβλημάτων.
- II. Ανάπτυξη των οντολογιακών εννοιών και διαμόρφωση των σχέσεων, ιδιοτήτων και δομών των οντολογιακών μοντέλων για την περιγραφή του τομέα.
- III. Ανάπτυξη τεχνικών για την αυτοματοποίηση της επιλογής και ανάπτυξης των μοντέλων με γνώσεις από τα οντολογιακά μοντέλα.
- IV. Σύνδεση των οντολογιακών μοντέλων, εννοιών, μαθηματικών μοντέλων με μια διεπιφάνεια χρήστη με χρήση φυσικών όρων, ώστε να εξασφαλιστεί η εύκολη πρόσβαση και η επαναληψιμότητα χρήσης.

Στη συνέχεια, αναλύονται και εξετάζονται τα βήματα αυτά, καθώς και παρουσιάζονται δύο περιπτώσεις εφαρμογής τους για ένα ενσωματωμένο βιοδωλιστήριο και ένα σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού.

#### 3.1. Αφαιρετική σύλληψη του τομέα

##### 3.1.1. Κατηγοριοποίηση των εννοιών

Η αφαιρετική σύλληψη του τομέα όπως έχει αναφερθεί παραπάνω, συμβάλλει στην καλύτερη οργάνωση του για τη κατάστρωση των λύσεων των προβλημάτων, καθώς και συμβάλλει στην ερμηνεία του τομέα με φυσικούς και κατανοητούς όρους. Η κάθε έννοια ενός τομέα μπορεί να έχει πολλές «μεταφράσεις», υποδηλώνοντας και ενεργοποιώντας μεθόδους, δεδομένα, μοντέλα και γνώση. Οι έννοιες για το τομέα της μηχανικής διεργασιών συγκεντρώνονται σε τέσσερις βασικές κατηγορίες:

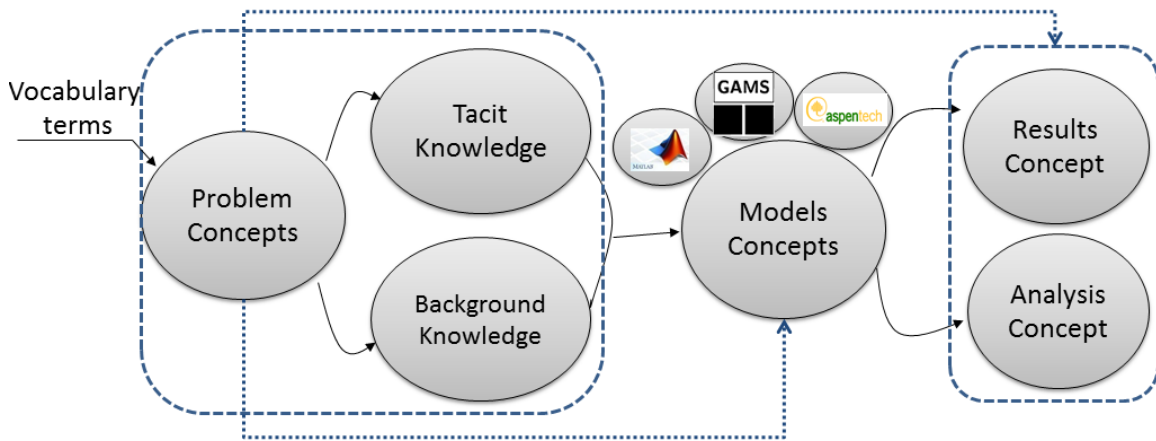
- Έννοιες περιγραφής προβλήματος: περιλαμβάνουν όλες τις δηλώσεις που χρησιμοποιούνται για τον ορισμό ενός προβλήματος. Οι έννοιες αυτές είναι

παρόμοιες με αυτές των συμβατικών μοντέλων που μπορεί να αναφέρονται σε (α) μονάδες μέτρησης, προδιαγραφές, εφαρμογές του τομέα και (β) κριτήρια επιλογής.

- Έννοιες σχετικά με γνώση υπόβαθρου και λανθάνουσα γνώση: η γνώση υπόβαθρου περιλαμβάνει τη διαθέσιμη γνώση υπό τη μορφή δεδομένων (δεδομένα LCA, χωροταξικά δεδομένα, δεδομένα κόστους, ισοζύγια μάζας και ενέργειας κτλ), ενώ η λανθάνουσα γνώση περιλαμβάνει τη γνώση που ενσωματώνει σημαντικές αλλά όχι εμφανή πληροφορίες που είναι σχετικές με το πλαίσιο του προβλήματος (τεχνολογίες ενεργοποίησης, ενδιάμεσα χημικά, παραπροϊόντα, αβεβαιότητες στην τροφοδοσία και τη τεχνολογία, διεργασίες εισόδου και εξόδου).
- Έννοιες μοντέλων: οι έννοιες αυτές καθορίζουν τα μονά ή πολλαπλά μοντέλα που απαιτούνται να χρησιμοποιηθούν για την επίλυση του προβλήματος. Εξαρτώνται έμμεσα από τις έννοιες περιγραφής προβλήματος, καθώς δηλώνουν ουσιαστικά το τύπο και αριθμό μοντέλων που απαιτούνται. Εξαρτώνται επίσης άμεσα από τη γνώση υπόβαθρου και τη λανθάνουσα γνώση καθώς οι έννοιες αυτές καθορίζουν το περιεχόμενο τους. Συνεπώς, οι προηγούμενες έννοιες ουσιαστικά αποτελούν την είσοδο (εννοιών) των εννοιών μοντέλου.
- Έννοιες ανάλυσης και αποτελεσμάτων: εφόσον έχουν οριστεί οι έννοιες μοντέλου και κατόπιν της εκτέλεσης τους, οι έννοιες ανάλυσης και αποτελεσμάτων ερμηνεύουν την έξοδο τους στη κατάλληλη μορφή όπως έχει καθοριστεί από τις έννοιες περιγραφής προβλήματος. Ουσιαστικά οι έννοιες αυτές συμβάλλουν στη φυσική γλώσσα καθώς μεταφράζουν τις πολύπλοκες μαθηματικές διαδικασίες που εμπλέκονται στα μοντέλα, σε συνοπτικά και κατανοητά αποτελέσματα.

### 3.1.2. Αλληλεπίδραση των εννοιών

Οι παραπάνω κατηγορίες εννοιών δεν είναι στατικές ή απομονωμένες. Αντιθέτως, αλληλεπιδρούν μεταξύ τους ώστε να σχεδιάσουν και να εκτελέσουν τη λύση των προβλημάτων του τομέα. Η αλληλεπίδραση και διαδοχή των εννοιών απεικονίζεται στο Σχήμα 9.



Σχήμα 9. Διαδοχή και αλληλεξάρτηση των κατηγοριών των εννοιών

Αρχικά, ο χρήστης δηλώνει την ερώτηση του ή αλλιώς το πρόβλημα του, ορίζοντας έτσι έμμεσα τις έννοιες περιγραφής προβλήματος. Ουσιαστικά οι λέξεις κλειδιά της ερώτησης που αφορούν το τομέα ερμηνεύονται επίσημα σε έννοιες περιγραφής του προβλήματος. Οι λέξεις αυτές όπως κέρδος, κόστος, αξίζει, συμφέρει, πόσο, που κτλ και ο συνδυασμός τους ουσιαστικά παρέχουν αρκετές πληροφορίες ώστε το σύστημα να αναγνωρίσει την πορεία που πρέπει να ακολουθηθεί και ακολούθως να δώσουν τη κατάλληλη απάντηση. Για παράδειγμα, η ερώτηση «Ποια βιομάζα με συμφέρει να αξιοποιήσω στη Βοιωτία?» ουσιαστικά υποδηλώνει τις εξής έννοιες προβλήματος: (α) τύπος βιομάζας («ποια βιομάζα»), (β) βιοδιυλιστήριο («βιομάζα»), (γ) κριτήριο κέρδους/κόστους («συμφέρει»). Οι έννοιες ουσιαστικά και η αλληλεπίδραση τους χαρτογραφούν το πρόβλημα, το οποίο στη συνέχεια υλοποιείται και εκτελείται με βοήθεια τεχνικών μέσων όπως θα δούμε στη συνέχεια του κεφαλαίου. Επομένως, κατόπιν δήλωσης του προβλήματος, επιλέγονται αναλόγως οι έννοιες γνώσης υπόβαθρου και κρυφής γνώσης. Οι έννοιες αυτές παρέχουν τη γνώση και τα δεδομένα που απαιτούνται για την πλήρη περιγραφή και επίλυση του προβλήματος. Η έννοια προβλήματος *τύπος βιομάζας* προκαλεί την ενεργοποίηση καταγραφής όλων των διαθέσιμων πρώτων υλών που θεωρούνται βιομάζα, καθώς και των δεδομένων τους, ενώ η έννοια του *βιοδιυλιστηρίου* υποδηλώνει τις τεχνολογίες που απαιτούνται σε μια εγκατάσταση για την επεξεργασία της βιομάζας, καθώς και τα χαρακτηριστικά τους. Επιπλέον, η έννοια του *κριτηρίου κέρδους/κόστους* ουσιαστικά προκαλεί την άντληση δεδομένων, εξισώσεων και υπολογισμών που σχετίζονται με τον υπολογισμό του κέρδους ή το κόστους. Στη συνέχεια, αναγνωρίζονται οι έννοιες μοντέλου και επιλέγονται τα κατάλληλα μοντέλα (από μια βιβλιοθήκη μοντέλων) που ικανοποιούν το στόχο του προβλήματος. Οι έννοιες μοντέλου ενεργοποιούνται από τις έννοιες περιγραφής προβλήματος και το περιεχόμενό τους καθορίζεται από τις έννοιες

γνώσης. Στο εξεταζόμενο παράδειγμα, οι έννοιες προβλήματος που εντοπίστηκαν υπονοούν την ανάκτηση ενός μοντέλου βελτιστοποίησης κέρδους/κόστους («συμφέρει»-κριτήριο κέρδους/κόστους) για ένα βιοδιωλιστήριο που έχει ως έξοδο τη συμφέρουσα βιομάζα (τύπος βιομάζας). Τέλος, ενεργοποιούνται οι έννοιες ανάλυσης/αποτελεσμάτων, που μεταφράζουν την έξοδο των μοντέλων στη κατάλληλη μορφή ανάλογα με τις δηλωμένες έννοιες προβλήματος. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα, οι έννοιες του προβλήματος προδιαθέτουν τις έννοιες αποτελεσμάτων να περιλαμβάνουν την επιλεγμένη συμφέρουσα βιομάζα. Τα αποτελέσματα θα προκύψουν από την έξοδο των εννοιών των μοντέλων. Με βάση τις δηλωμένες έννοιες του παραδείγματος δεν υπονοείται κάποια περαιτέρω ανάλυση ή κάποια συγκεκριμένη μορφή αποτελέσματος.

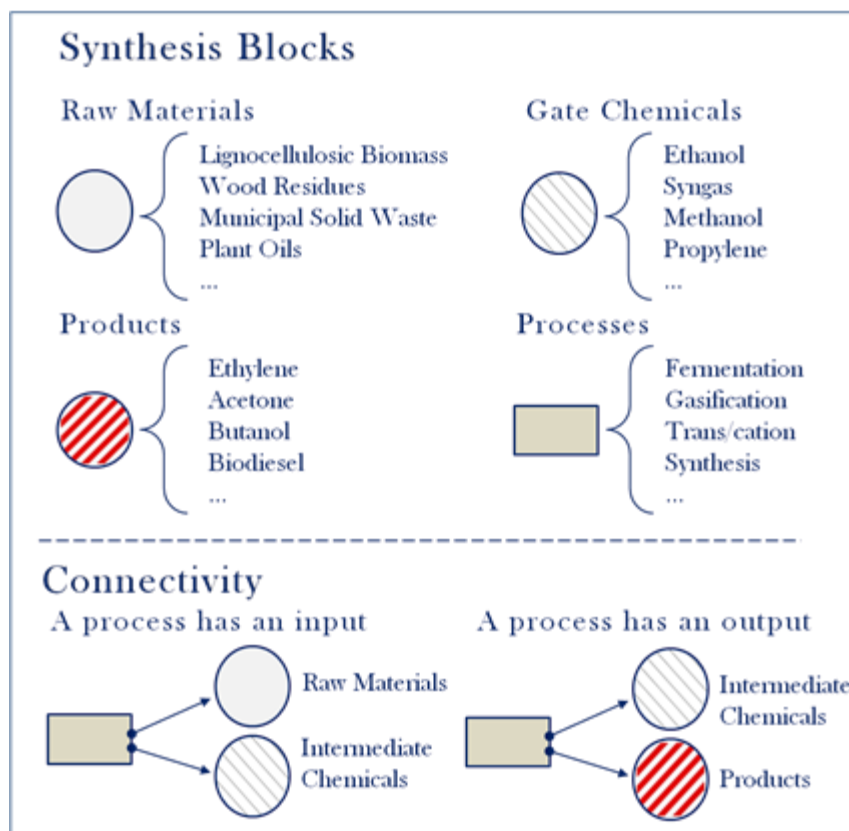
### 3.2. Η Σύνθεση στα Βιοδιωλιστήρια

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζεται η μέθοδος ανάπτυξης των υπερδομών των βιοδιωλιστηρίων, ώστε να κατανοηθεί καλύτερα η αφαιρετική σύλληψη στο τομέα και η συνεισφορά των τεχνικών μέσων (οντολογιακή μηχανική, Java) που χρησιμοποιούνται.

Τα Βιοδιωλιστήρια είναι ένα σημαντικό και αναπτυσσόμενο πεδίο στο οποίο η οντολογιακή μηχανική έχει τη δυνατότητα να συνεισφέρει σε μεγάλο βαθμό. Οι πολυάριθμες δυνατότητες παραγωγής χημικών, καυσίμων και ενέργειας προσφέρουν μια σημαντική ευκαιρία συνδυασμού τεχνολογιών και βελτιστοποίησης του δικτύου που χρησιμοποιεί τα διαθέσιμα δεδομένα, μοντέλα και γνώση στην περιοχή.

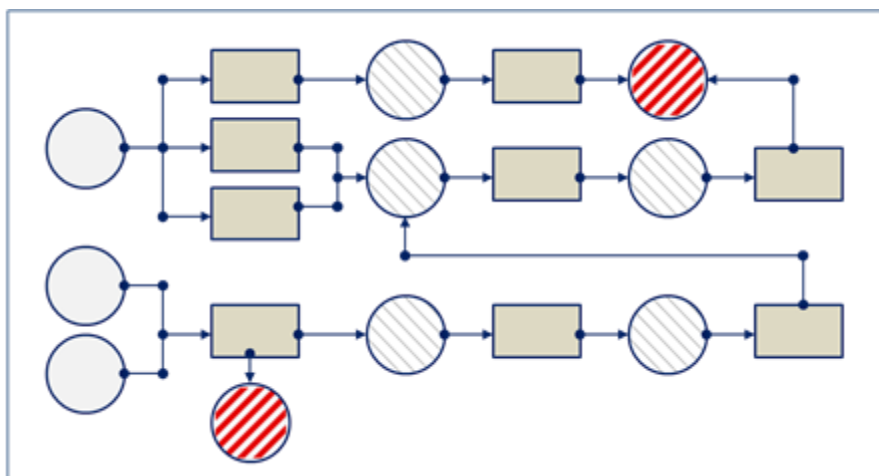
Μια κοινή προσέγγιση είναι η μελέτη των διαδρομών διεργασίας που ξεκινούν από τη διαθέσιμη βιομάζα και παράγουν ένα συγκεκριμένο χημικό ή καύσιμο. Η πρακτική αυτή δεν λαμβάνει υπόψη βασικές παραμέτρους των ρευμάτων, ενδιάμεσων χημικών και διεργασιών της ενσωμάτωσης. Το κενό αυτό καλύπτεται με την ανάπτυξη υπερδομών, δημιουργώντας μια ολιστική προσέγγιση για τα προβλήματα βελτιστοποίησης.

Για την ανάπτυξη της υπερδομής απαιτούνται βήματα σύνθεσης. Επομένως, σε πρώτη φάση ορίζονται οι ομάδες σύνθεσης. Στην περίπτωση των βιοδιωλιστηρίων οι ομάδες αυτές είναι οι πρώτες ύλες, τα ενδιάμεσα χημικά, τα προϊόντα και οι διεργασίες. Παράλληλα ρυθμίζεται μια βάση συνδεσιμότητας μεταξύ των ομάδων (Σχήμα 10).



Σχήμα 10. Διαδικασία σύνθεσης των υπερδομών

Οι ομάδες σύνθεσης συνδέονται συστημικά μέσω της ομάδας των διεργασιών. Μια διεργασία ενώνει μία πρώτη ύλη ή ένα ενδιάμεσο χημικό με ένα ενδιάμεσο χημικό ή ένα προϊόν. Το δίκτυο που αναπτύσσεται μέσω των ενώσεων των ομάδων σύνθεσης αποτελεί μια υπερδομή (Σχήμα 11).

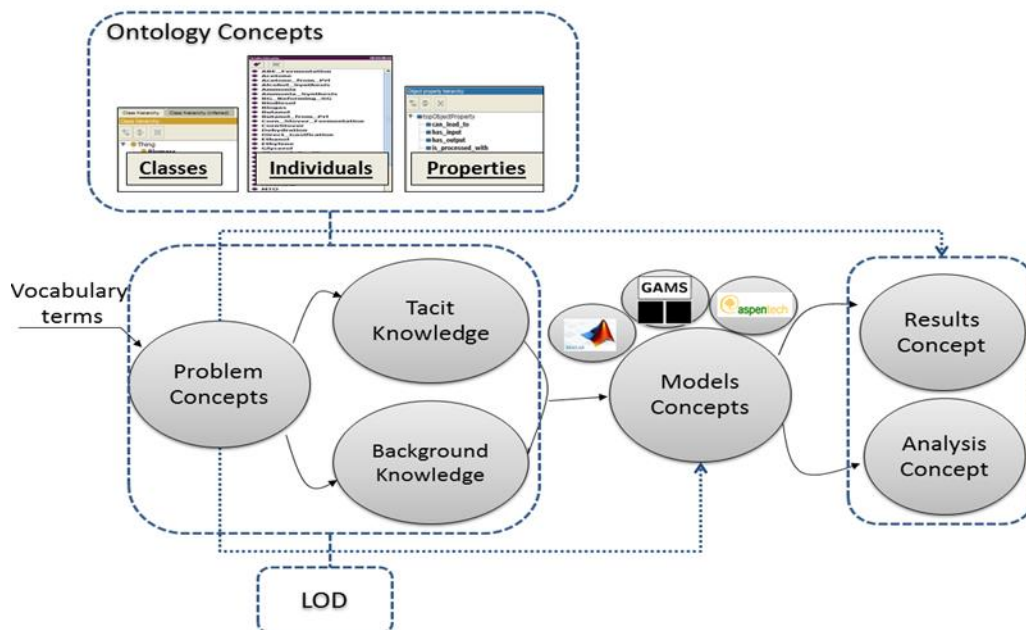


Σχήμα 11. Απεικόνιση υπερδομής

Είναι εμφανές ότι το ευρύ πεδίο των βιοδυλιστηρίων ευδοκιμεί για ταξινόμηση μέσω των οντολογιών. Οι οντολογίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ανάπτυξη των απλών χημικών μονοπατιών (με απλές λειτουργίες) και για τη διαχείριση των υπερδομών (με πιο σύνθετες λειτουργίες). Επιπλέον, προσφέρουν συσχέτιση και πρόσβαση με ετερογενή δεδομένα όπως μοντέλα, υπολογιστικά φύλλα, δεδομένα διαγραμμάτων ροής κτλ. Στη συνέχεια της διατριβής θα αναλυθεί ο ρόλος των οντολογιών στη σύνθεση.

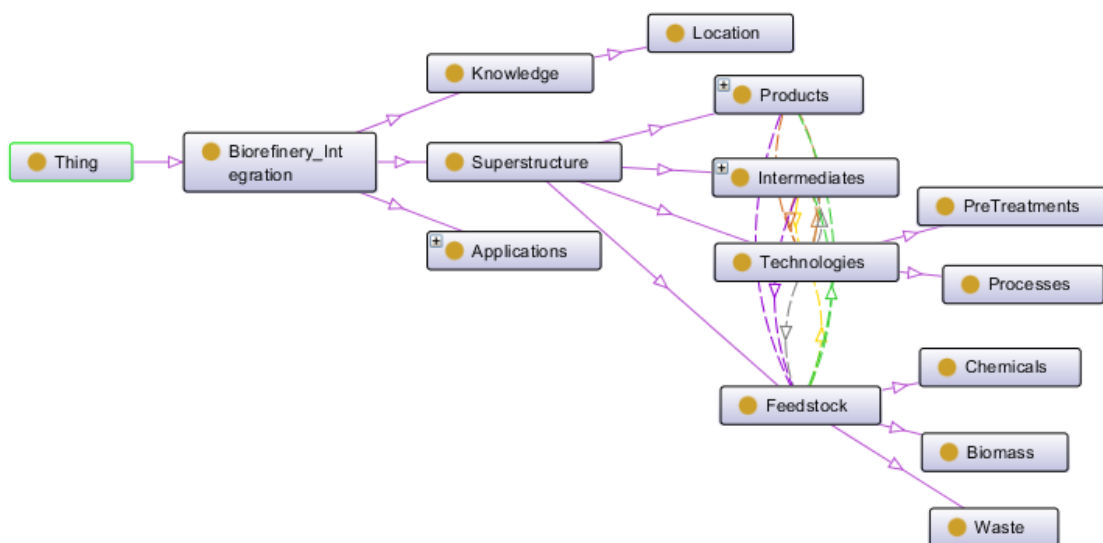
### 3.3. Οντολογιακή Μηχανική

Η σημασία των οντολογιών, οι λειτουργίες και η μέθοδος χρήσης έχει ήδη αναλυθεί στο θεωρητικό υπόβαθρο. Στο τμήμα αυτό αναλύεται ο ρόλος των οντολογιών στη μεθοδολογία και ο τρόπος σύνδεσης τους με τις κατηγορίες εννοιών. Οι οντολογίες επιστρατεύονται κυρίως για την περιγραφή της σύνθεσης, δηλαδή την ανάπτυξη των υπερδομών και την ανάκτηση δεδομένων που σχετίζονται με αυτή. Οι υπερδομές ουσιαστικά αποτελούν μέρος των εννοιών κρυφής γνώσης, ενώ τα δεδομένα τους της γνώσης υποβάθρου. Η οντολογία παίρνει έμμεσα κατευθύνσεις από τις έννοιες περιγραφής προβλημάτων, δηλαδή οι οντολογιακές έννοιες καθορίζονται από αυτές. Επομένως ένα οντολογιακό μοντέλο που περιγράφει το τομέα σύνθεσης εξαρτάται από τις έννοιες προβλήματος και εκφράζει της έννοιες γνώσης. Η συμμετοχή των οντολογιών στις αλληλεπιδράσεις των εννοιών απεικονίζεται στο Σχήμα 12.



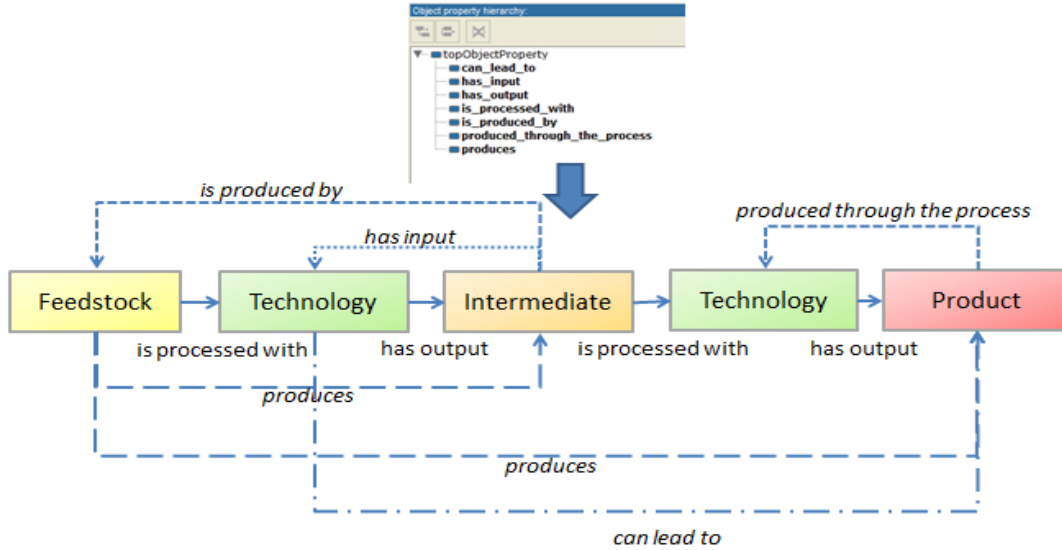
Σχήμα 12. Επίδραση οντολογιών στις κατηγορίες εννοιών

Για την έκφραση και απεικόνιση των υπερδομών γίνεται χρήση των κλάσεων, μελών, σχέσεων και των ιδιοτήτων της οντολογιακής γλώσσας OWL 2. Στο κείμενο όταν αναφερόμαστε στην OWL εννοούμε τη νεότερη έκδοση της OWL 2. Οι βασικές κλάσεις που περιγράφουν την υπερδομή είναι τέσσερις, (α) οι τεχνολογίες, (β) τα τελικά προϊόντα, (γ) τα ενδιάμεσα χημικά και (δ) οι πρώτες ύλες. Οι κλάσεις αυτές μπορούν να περιέχουν άλλες υποκλάσεις που να αναλύουν τις έννοιες σε επιμέρους και να κάνουν πιο πολύπλοκο το οντολογιακό μοντέλο. Για παράδειγμα οι πρώτες ύλες μπορούν να περιλαμβάνουν βιομάζα, απόβλητα ή απλά χημικά. Καθένα από αυτά θα μπορούσε να αντιπροσωπεύει μια ξεχωριστή υποκλάση. Στο Σχήμα 13 απεικονίζονται οι κλάσεις και υποκλάσεις που μπορούν να σχηματιστούν για τις υπερδομές.



Σχήμα 13. Απεικόνιση των κλάσεων μέσα από τον επεξεργαστή οντολογιών Protégé (Η κλάση «Thing» αποτελεί τη κλάση εκκίνησης για κάθε νέα οντολογία στο Protégé).

Παρόλαυτα, για λόγους απλοποίησης δεν χρησιμοποιούμε υποκλάσεις, καθώς η ουσία της περιγραφής της σύνθεσης μπορεί να αναπαρασταθεί με τις κύριες κλάσεις. Οι έννοιες των κλάσεων συνδέονται με κατάλληλες σχέσεις και ιδιότητες ώστε να περιγράφουν όλες τις δυνατές συνδέσεις των συστατικών των υπερδομών. Οι σχέσεις αυτές, καθώς και ο αντίστοιχος τομέας και το εύρος τους απεικονίζονται στο Σχήμα 14. Τυπικά οι σχέσεις *is processed with* και *has output* περιγράφουν απλές σχέσεις σύνδεσης μεταξύ των συστατικών, ενώ η πολυπλοκότητα και οι συνδυασμοί αυξάνονται με τη χρήση των υπολοίπων σχέσεων (*is produced by*, *has input*, *produces*, *can lead to*, *produced through the process*).



Σχήμα 14. Σχέσεις που συνδέουν τις κλάσεις, εύρος και τομέας

Οι σχέσεις αυτές έχουν επίσης κάποιες ενσωματωμένες ιδιότητες που παρουσιάζονται στο Σχήμα 15 και διαμορφώνουν την τεκμηρίωση των οντολογιών. Όλες οι σχέσεις είναι ασυμμετρικές και μη αντικατοπτριστικές, ενώ οι σχέσεις *produces* και *produced by* είναι μεταβατικές. Η σημασία και οι επιδράσεις των ιδιοτήτων αυτών αναφέρονται στο θεωρητικό υπόβαθρο.

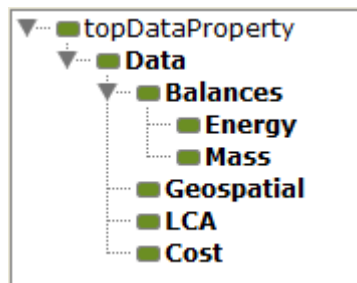
Object Property	Func	Sym	Inv Func	Trans	ASym	Refl	Irrefl	Domain	Range	Inverse
produced_through	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Products, In...	Technologies	has_output
is_processed_with	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Intermediate...	Technologies	has_input
produces	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Intermediate...	Products, In...	
has_output	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Technologies	Products, In...	produced_t...
produced_by	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Products, In...	Intermediate...	
has_input	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Technologies	Intermediate...	is_process...

Σχήμα 15. Ιδιότητες σχέσεων στην οντολογία

Οι παραπάνω σχέσεις αποτελούν σχέσεις αντικειμένων στην οντολογία και επαρκούν για την περιγραφή και ανάκτηση των υπερδομών, και επομένως της αναπαράστασης των εννοιών κρυφής γνώσης. Παράλληλα με τις σχέσεις αυτές, χρησιμοποιούνται και σχέσεις τύπου δεδομένων, οι οποίες περιέχουν δεδομένα που σχετίζονται με τα συστατικά των υπερδομών και λαμβάνουν συγκεκριμένες τιμές, όρια τιμών, λεκτικά σύνολα, μονάδες μέτρησης, boolean. Αυτές οι σχέσεις αντικατοπτρίζουν τις έννοιες γνώσης του υπόβαθρου. Παρέχουν τα κατάλληλα ποσοτικά αλλά και ποιοτικά δεδομένα για την συμπλήρωση των μοντέλων ανάλογα με τις συνθήκες και τις προδιαγραφές του

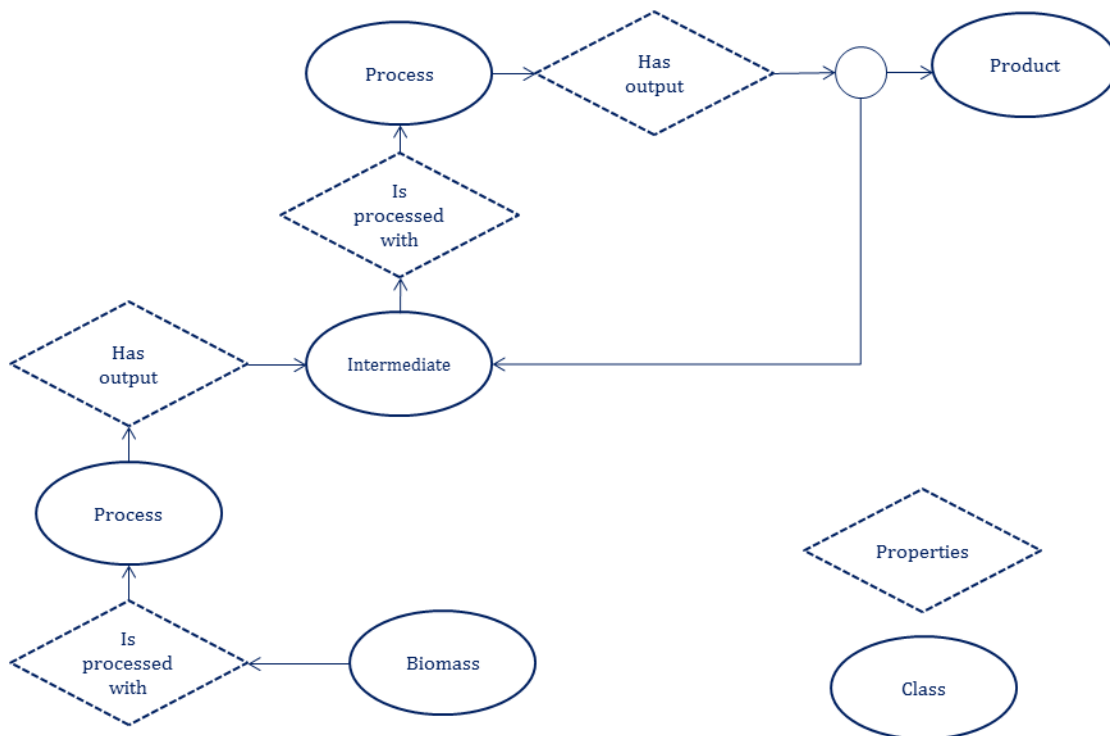


προβλήματος. Οι σχέσεις τύπου δεδομένων που χρησιμοποιούνται στην οντολογία εντοπίζονται στο Σχήμα 16.



Σχήμα 16. Σχέσεις τύπου δεδομένων στην οντολογία

Πολύ σημαντικό ρόλο στην οντολογιακή μηχανική διαδραματίζουν οι ερωτήσεις SPARQL ώστε να επιτευχθεί ο κατάλληλος σκοπός της κάθε οντολογίας. Ουσιαστικά τα οι ερωτήσεις αυτές εξάγουν τα κατάλληλα μέλη των κλάσεων που ικανοποιούν τις ορισμένες οντολογιακές σχέσεις και δηλωμένους περιορισμούς. Για την ανάκτηση της υπερδομής από τις οντολογίες επικαλείται ένας αλγόριθμος διαδοχικών ερωτήσεων SPARQL που εκφράζεται μέσω μιας αντικειμενοφόρου γλώσσας προγραμματισμού (Java, στην περίπτωση μας) και της βιβλιοθήκης Jena, που προσφέρει το πλαίσιο για την ανάγνωση των οντολογιών. Ο αλγόριθμος με δεδομένη τη βιομάζα του προβλήματος, απεικονίζεται στο Σχήμα 17. Ουσιαστικά κάθε βέλος αναπαριστά μια ερώτηση SPARQL προς το οντολογιακό μοντέλο, όπου το βέλος αποτελεί το κατηγορούμενο (δηλαδή τη σχέση) και τα συνδεόμενα μέλη, τις έννοιες (δηλαδή τα μέλη των κλάσεων). Σε κάθε ερώτηση, ανακτώνται ένα ή περισσότερα μέλη, που στη συνέχεια γίνονται το υποκείμενο ή αντικείμενο της επόμενης ερώτησης. Οι ερωτήσεις, καθώς και ο αλγόριθμος διαμορφώνονται ανάλογα με τα διαθέσιμα δεδομένα. Το είδος των δεδομένων που ορίζει ο χρήστης αναγνωρίζονται από την οντολογία (δηλαδή η έννοια, κλάση που ανήκει) και ο αλγόριθμος στο πλαίσιο του προγραμματισμού προσαρμόζεται αναλόγως. Για παράδειγμα αν στο εξεταζόμενο πρόβλημα ήταν γνωστό μόνο το επιθυμητό προϊόν, τότε ο αλγόριθμος θα ήταν αντίστροφος και τα κατηγορούμενα/βέλη/σχέσεις θα άλλαζαν.



Σχήμα 17. Αλγόριθμος ερωτήσεων SPARQL για την εξαγωγή των υπερδομών

### 3.4. Επιλογή και ανάπτυξη μοντέλων

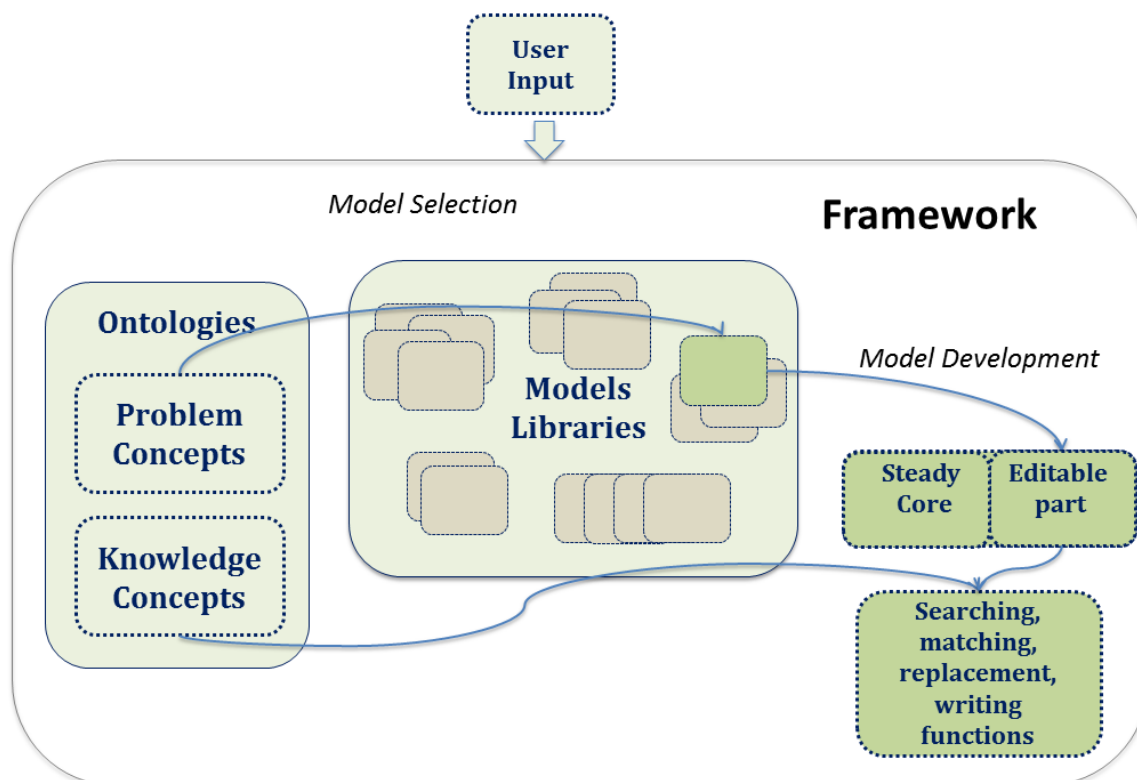
Αφού ανακτηθούν οι απαραίτητες οντολογιακές έννοιες για την περιγραφή του προβλήματος τα επόμενα βήματα είναι (α) η επιλογή του/των κατάλληλου/λων μοντέλου/λων, (β) η τοποθέτηση των οντολογιακών εννοιών και δεδομένων στα μοντέλα στη κατάλληλη μορφή, και (γ) η εκτέλεση των μοντέλων. Τα βήματα αυτά συντονίζονται μέσω της διεπιφάνειας χρήστη, δηλαδή του πλαισίου που έχει αναπτυχθεί μέσω της Java (βλ. Παράρτημα Β). Η διαδικασία επιλογής και ανάπτυξης μοντέλων παρουσιάζεται συνοπτικά στο Σχήμα 18. Οι έννοιες προβλήματος που έχουν ανιχνευθεί στην οντολογία ενεργοποιούν την κατάλληλη επιλογή των μοντέλων. Οι δηλώσεις του χρήστη, δηλαδή οι λέξεις κλειδιά, αναγνωρίζονται από το προγραμματιστικό πλαίσιο και επικαλούνται από μια βιβλιοθήκη μοντέλων, τα κατάλληλα που ικανοποιούν το επιθυμητό αποτέλεσμα του χρήστη. Τα μοντέλα αυτά μπορεί να είναι διαφόρων τύπων (GAMS, MATLAB, Excel, Python, Fortran κτλ.) και να εκτελούν ποικίλες λειτουργίες (βελτιστοποίηση, σύνθεση, ανάλυση αβεβαιότητας κτλ.). Η επέμβαση στα μοντέλα μπορεί να πραγματοποιηθεί με δύο τρόπους:

- i. Μέσω του API των επεξεργαστών των μοντέλων με κατάλληλες εντολές τροποποίησης που εμπεριέχονται. Οι επεξεργαστές μοντέλων συνήθως παρέχουν μια βιβλιοθήκη και το κατάλληλο API που προορίζονται για την αντίστοιχη γλώσσα προγραμματισμού, και περιέχουν τις μεθόδους, εντολές και λειτουργίες τους. Επιλέγεται το κατάλληλο API που προορίζεται για τη γλώσσα προγραμματισμού που χρησιμοποιούμε για την ανάπτυξη του πλαισίου του προβλήματος (π.χ. Java). Η αντίστοιχη βιβλιοθήκη (σε μορφή .jar για τη Java) εισάγεται στο πλαίσιο και επικαλείται. Μέσω των κατάλληλων εντολών τροποποιείται το περιεχόμενο των μοντέλων (διαγραφή τμημάτων του κώδικα, εισαγωγή νέων, αλλαγή κτλ.) καθώς και η εκτέλεση των μοντέλων.
- ii. Ουσιαστικά τα μοντέλα είναι σαν αρχεία κειμένου που περιέχουν κώδικα ο οποίος διαβάζεται από τους αντίστοιχους επεξεργαστές τους. Αντιμετωπίζοντας έτσι το μοντέλο σαν αρχείο κειμένου και σκανάροντας το, υπάρχει η δυνατότητα εύκολης πρόσβασης και τροποποίησης του περιεχομένου του μοντέλου. Μέσα από τις εντολές που παρέχει η γλώσσα προγραμματισμού, το μοντέλο επικαλείται και οι επιθυμητές αλλαγές πραγματοποιούνται μέσω των εντολών επεξεργασίας κειμένου της γλώσσας. Παρόλαυτα στην εκτέλεση των μοντέλων τα πράγματα είναι πιο σύνθετα, καθώς αυτή πραγματοποιείται μέσω ρομποτικών χαρακτήρων-κλειδιών, που δημιουργεί συχνά σφάλματα.

Ο 1<sup>ος</sup> τρόπος είναι πιο λειτουργικός και αποτελεσματικός, καθώς η διαδικασία αν και πιο πολύπλοκη, είναι πιο ορθολογική. Επίσης, είναι καθολικός καθώς μπορεί να εφαρμοστεί για τους περισσότερους τύπους μοντέλων. Αντίθετα ο 2<sup>ος</sup> τρόπος είναι πρακτικός, αλλά δεν λειτουργεί με όλους τους τύπους μοντέλων (έχει εφαρμοστεί επιτυχώς με μοντέλα τύπου GAMS και MATLAB) και δημιουργεί προβλήματα κυρίως στην αυτοματοποιημένη εκτέλεση των μοντέλων. Ιδιαίτερα όταν απαιτείται χρήση πολλαπλών μοντέλων για την επίλυση προβλήματος τα οποία χρησιμοποιούν γνώση που πρέπει να μεταφερθεί από το ένα στο άλλο.

Η τροποποίηση των περιεχομένων των μοντέλων πραγματοποιείται μέσω εντολών αναζήτησης, ταυτοποίησης και αντικατάστασης. Τα μοντέλα χωρίζονται νοητά σε δύο τμήματα, (α) τον κυρίως κορμό που παραμένει σταθερός ανεξάρτητα από τις συνθήκες, καταστάσεις και δεδομένα εισαγωγής, και (β) το μεταβλητό μέρος των μοντέλων που αλλάζει ανάλογα με τα δεδομένα του προβλήματος. Είναι προφανές ότι μόνο το μεταβλητό μέρος αλληλοεπιδρά με την οντολογία, η οποία καθορίζει το περιεχόμενο τους. Ουσιαστικά τα μεταβλητά μέρη των μοντέλων είναι δηλωμένα στο προγραμματιστικό πλαίσιο. Τα μέρη αυτά περιέχουν χαρακτηριστική μορφή κώδικα και βρίσκονται σε διάφορα διάσπαρτα σημεία στο μοντέλο. Τα σημεία αυτά αναγνωρίζονται μέσα από εντολές αναζήτησης και ταυτοποίησης λεκτικών συνόλων της γλώσσας προγραμματισμού. Για παράδειγμα, τα δεδομένα που εξάγονται από την οντολογία,

ανάλογα με το είδος τους θα τοποθετηθούν στα ανάλογα σημεία, τα οποία ανιχνεύονται αναζητώντας λεκτικά σύνολα στο κώδικα που σχετίζονται με αυτά. Μόλις εντοπιστούν τότε αρχίζει η τροποποίηση στα σημεία αυτά με νέες εντολές προσθήκης, διαγραφής, αντικατάστασης κειμένου. Το νέο «κείμενο» ουσιαστικά είναι οι έννοιες της οντολογίας, οι οποίες μετατρέπονται στη κατάλληλη μορφή κειμένου που αναγνωρίζει το μοντέλο.



Σχήμα 18. Συνοπτική διαδικασία επιλογής και ανάπτυξης μοντέλων

### 3.5. Ανάπτυξη πλαισίου ενσωμάτωσης και διεπιφάνεια χρήστη (UI)

Το πλαίσιο είτε πρόκειται για ιστοσελίδα, ένα web server, μια επιτραπέζια εφαρμογή τελεί καθοριστικό ρόλο στην εκτέλεση και στο συντονισμό των δράσεων και λειτουργιών που απαιτούνται, καθώς και στην ερμηνεία αυτών με φυσική γλώσσα. Μια οντολογία συνεισφέρει στη φυσική γλώσσα αλλά για να έχει πρακτική εφαρμογή πρέπει να συνοδεύεται από το κατάλληλο πλαίσιο έκφρασης της. Το πλαίσιο αυτό συγκεντρώνει τις εξής δράσεις και λειτουργίες:

- i. Προσφέρει ένα χώρο έκφρασης και επεξεργασίας της οντολογίας, καθώς και των ερωτήσεων SPARQL.

- ii. Καλεί τα μοντέλα, μεταφέρει τα δεδομένα από την οντολογία και συντονίζει την επεξεργασία τους.
- iii. Αποτελεί τα «μάτια» του χρήστη και επομένως καθορίζει την επικοινωνία του με το οντολογιακό περιβάλλον και τα μοντέλα. Αντιπροσωπεύει δηλαδή τη φυσική γλώσσα. Καθοδηγεί τα δεδομένα εισαγωγής που απαιτούνται από το χρήστη, καθώς και εκφράζει τις έννοιες αποτελεσμάτων και ανάλυσης.

Τα δύο πρώτα έχουν ήδη αναλυθεί στις προηγούμενες ενότητες και ο ρόλος του πλαισίου σε αυτά είναι εμφανής. Η ενότητα αυτή επικεντρώνεται κυρίως στο 3<sup>ο</sup>, τη συνεισφορά του πλαισίου στη φυσική γλώσσα.

Είναι αναμενόμενο ότι η διαμόρφωση του πλαισίου εξαρτάται από την αφαιρετική σύλληψη του τομέα, καθώς και το είδος του τομέα. Οι κατάλληλοι φυσικοί όροι που περιγράφουν το τομέα έχουν τους ακόλουθους στόχους:

- Την απόκρυψη των πολύπλοκων ερωτήσεων SPARQL προς την οντολογία με απλούς φυσικούς όρους, κατανοητούς από μη ειδικούς του τομέα.
- Την αυτοματοποιημένη ενεργοποίηση των μοντέλων και των περίπλοκων χειρισμών που απαιτούνται, μέσω των επιλογών του χρήστη μεταφρασμένες σε φυσικούς όρους.

Με αυτό το τρόπο οι οντολογίες και τα μοντέλα μεταφράζονται και γίνονται αξιοποιήσιμα από κάθε χρήστη ειδικό και μη. Με άλλα λόγια το πλαίσιο που αναπτύσσεται, αποτελεί το χώρο σύστασης των απλών ερωτήσεων από το χρήστη, όπως παρουσιάστηκαν στην ενότητα της αφαιρετικής σύλληψης του τομέα. Παραδείγματα τέτοιων ερωτήσεων για τους μη ειδικούς χρήστες αποτελούν οι εξής: «Τι μπορώ να παράγω από βιομάζα από ξύλο?», «Με συμφέρει να στήσω μια εγκατάσταση βιοαερίου στην Αττική?», «Ποια προϊόντα με συμφέρει να παράγω στη μονάδα μου?». Στο πλαίσιο ο τρόπος δήλωσης των ερωτήσεων μπορεί να γίνει με διάφορους τρόπους, ανάλογα με τις επιθυμητές προδιαγραφές (π.χ. με κουτιά επιλογής ή χώρο εισαγωγής δεδομένων ή κουμπιά). Ανεξαρτήτου του τρόπου έκφρασης των ερωτήσεων, πρέπει να χρησιμοποιούνται απλοί φυσικοί όροι που να είναι κατανοητοί ευρέως, και παράλληλα να συνδέονται με τις σωστές μεθόδους και διαδικασίες για την εξυπηρέτηση του σκοπού που υπηρετούν. Για παράδειγμα, όταν ο χρήστης δηλώνει κάποια πρώτη ύλη και κάποιο κριτήριο χρήσης ή μελέτη τους (π.χ. πιθανά κερδοφόρα προϊόντα) οι έννοιες που συνδέονται με την πρώτη ύλη ανακτώνται από την οντολογία με σκοπό την εκτέλεση της κατάλληλης μεθόδου με τις έννοιες αυτές, δηλαδή του μοντέλου, για την επίτευξη μιας ολοκληρωμένης απάντησης στο μεγαλύτερο δυνατό βαθμό. Συχνά ο χρήστης μπορεί να μην διαθέτει όλες τις δυνατές πληροφορίες που απαιτούνται από κάποια πιο πολύπλοκα μοντέλα. Όταν συμβαίνει αυτό ακολουθούνται μια από τις εξής τακτικές: (α) αν είναι δυνατό επιλέγονται αυτόματα κάποιες προεπιλεγμένες τιμές σύμφωνα με τις

προδιαγραφές του μοντέλου, (β) ο χρήστης καλείται να δώσει αποκλίσεις τιμών (θα προκύψει αναμενόμενη ανακρίβεια ή απόκλιση του αποτελέσματος), (γ) ο χρήστης κατευθύνεται να εισάγει λεκτικές εκτιμήσεις που θα ερμηνευτούν από το πλαίσιο με τις κατάλληλες τιμές. Για παράδειγμα, αν ο χρήστης δεν γνωρίζει ακριβώς τι βιομάζα διαθέτει, αλλά μόνο το ότι η βιομάζα του προέρχεται από αγροκαλλιέργειες, τότε μέσω της οντολογίας οι βιομάζες που σχετίζονται με αγροκαλλιέργειες θα ανακτηθούν. Παρομοίως, αν ο χρήστης δεν γνωρίζει στην περιοχή που θέλει να στήσει μια εγκατάσταση τι πόροι είναι διαθέσιμοι (π.χ. στη Βοιωτία), εισάγοντας την επιλογή της περιοχής οι αντίστοιχοι πόροι θα διερευνηθούν. Διαφορετική περίπτωση αλλά ίδια λογική είναι όταν ο χρήστης δεν γνωρίζει κάποια ποσοτική παράμετρο αλλά μπορεί να δώσει ποιοτική εκτίμηση, τότε η ποιοτική εκτίμηση μεταφράζεται σε ποσοτικούς όρους. Δηλαδή αν ένα μοντέλο προϋποθέτει τον ποσοτικό ορισμό κάποιας ζήτησης προϊόντων, τότε μπορεί να δοθεί στο χρήστη η δυνατότητα επιλογής «υψηλής» ή «χαμηλής» αν δεν γνωρίζει το ακριβές ποσό. Οι όροι αυτοί τότε συνδέονται στην οντολογία ή το πλαίσιο με τις ποσοτικές εκτιμήσεις που τους αναλογούν.

Ένας ακόμη στόχος που μελετήθηκε στην εργασία είναι η δυναμικότητα και η βιωσιμότητα της οντολογίας. Έτσι εξασφαλίζεται ακόμη μεγαλύτερος βαθμός «φυσικότητας» και γίνεται προσβάσιμη σε χρήστες που δεν επιθυμούν να εντρυφήσουν στις οντολογίες. Για το σκοπό αυτό μέσω του προγραμματιστικού πλαισίου ο τελικός χρήστης μπορεί να έχει πρόσβαση στην οντολογία και να επεμβαίνει κατευθυνόμενα. Χρησιμοποιώντας ως μέσο επικοινωνίας ανάμεσα στο χρήστη και την οντολογία τη Java και την ανοιχτή βιβλιοθήκη Jena, εκτελούνται εντολές που τροποποιούν το συντακτικό και μορφολογικό περιεχόμενο του οντολογιακού μοντέλου. Η ενημέρωση της οντολογίας με νέα δεδομένα που θέλει να εισάγει ο χρήστης προέρχεται από δύο πηγές:

- Έμμεσα, παίρνοντας τα αποτελέσματα των μοντέλων και αντικαθιστώντας ή συμπληρώνοντας την υπάρχουσα γνώση με τη νέα. Όταν προκύψει η λύση του προβλήματος από το μοντέλο, ο χρήστης έχει την προαιρετική επιλογή να προσθέσει το αποτέλεσμα αυτό στην οντολογία. Η μετατροπή στην απαραίτητη μορφή γίνεται στο υπόβαθρο.
- Άμεσα, όταν ο χρήστης προσθέτει έννοιες και ιδιότητες στο αρχείο της οντολογίας μέσω του πλαισίου. Χωρίς την ανάγκη ύπαρξης του οντολογιακού επεξεργαστή (π.χ. Protégé) αλλά μέσω φυσικής γλώσσας ο χρήστης μπορεί εύκολα να προσθέσει τις έννοιες και απαραίτητες σχέσεις στην οντολογία. Τα γνωρίσματα και οι ιδιότητες συμπληρώνονται αυτόματα από το πλαίσιο.

Η «φυσική» επέμβαση του χρήστη στην οντολογία αν και επιθυμητή μπορεί να προκαλέσει προβλήματα σε ορισμένες περιπτώσεις, καθώς η διόρθωση πιθανών

σφαλμάτων και η σύνθετη τροποποίηση της (π.χ. πολλαπλές σχέσεις με περιορισμούς) δεν είναι αποτελεσματική προγραμματιστικά για χρήστες που δεν είναι ειδικοί.

Συνοψίζοντας η αφαιρετική σύλληψη του τομέα θα καθορίσει τις σχεδιαστικές παραμέτρους και το τρόπο αλληλεπίδρασης του χρήστη με την επιφάνεια. Ο σχεδιασμός πρέπει να βασίζεται στη φυσική γλώσσα, ώστε να απευθύνεται και σε μη ειδικούς που ενδιαφέρονται να διερευνήσουν το τομέα. Η φυσική γλώσσα εκφράζεται μέσω του πλαισίου και υποβοηθείται από τις οντολογίες και τη σύνδεση δεδομένων και εννοιών προγραμματιστικά.

---

## **ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ & ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ**

---



## 4. Εφαρμογές και αποτελέσματα

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκαν δύο διαφορετικά συστήματα. Το βασικότερο, που εξετάστηκε στο μεγαλύτερο μέρος της διάρκειας της εργασίας, είναι ένα ενσωματωμένο βιοδυλιστήριο. Η δεύτερη εφαρμογή αποτελεί ένα σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού. Και στα δύο συστήματα εφαρμόστηκε παρόμοια μεθοδολογία (περιέχουν προβλήματα σύνθεσης) με κάποιες διαφοροποιήσεις. Προτιμήθηκε τα δύο συστήματα να μην ενσωματωθούν στο ίδιο πλαίσιο για λόγους απλούστευσης, ευπαρουσίασης καθώς και της διαφοροποίησης τους. Στη συνέχεια θα αναλυθεί το περιεχόμενο των δύο συστημάτων καθώς και θα παρουσιαστεί η εφαρμογή της μεθοδολογίας στο καθένα από αυτά.

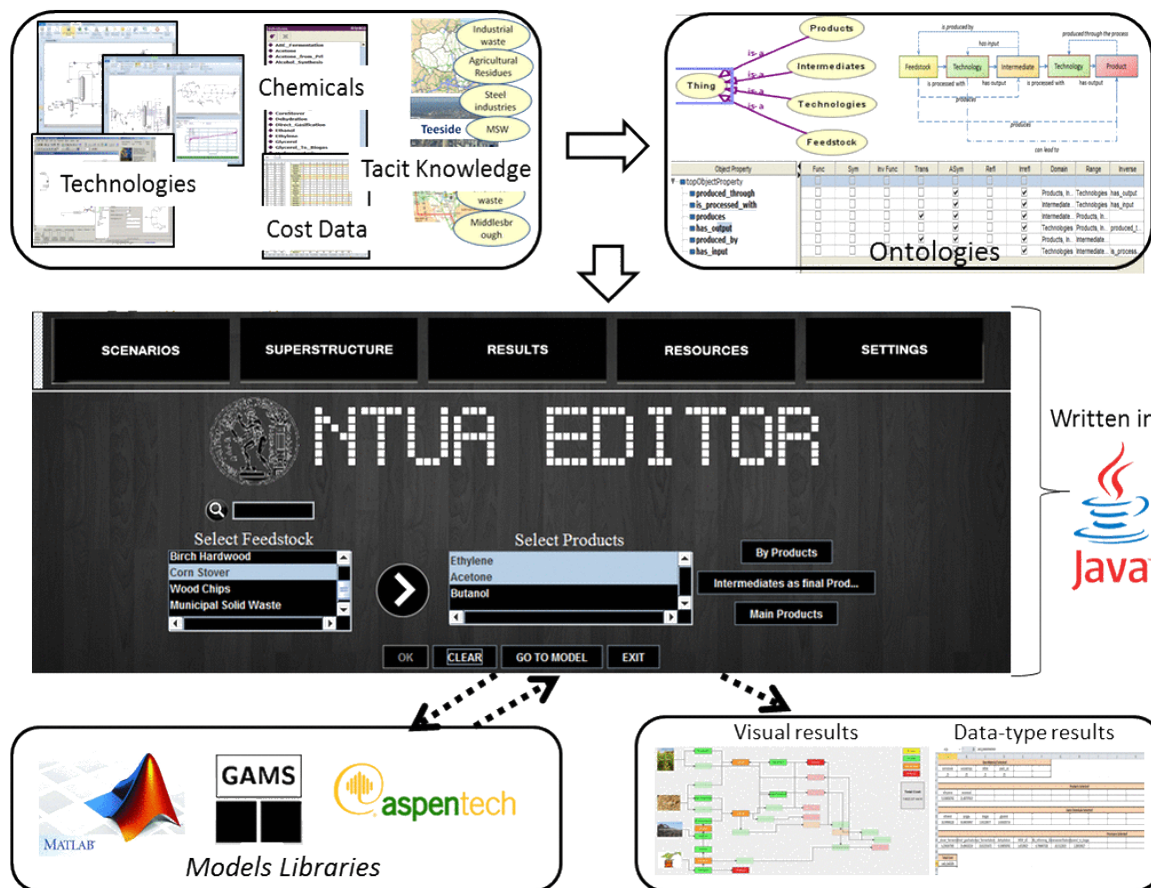
### 4.1. Εφαρμογή για τα Βιοδυλιστήρια

Στην παρούσα εφαρμογή ενσωματώθηκαν δύο διαφορετικά βιοδυλιστήρια στο ίδιο πλαίσιο έκφρασης. Το ενσωματωμένο αυτό βιοδυλιστήριο περιγράφεται από μια πολύ μεγάλη υπερδομή. Τα μοντέλα που χρησιμοποιούνται για το βιοδυλιστήριο εξαρτώνται από τη σύνθεση, δηλαδή την υπερδομή που σχηματίζεται ανάλογα με τις συνθήκες του προβλήματος. Τα μοντέλα αυτά (GAMS) συμβάλλουν στη λήψη αποφάσεων και εκτελούν ανάλυση αβεβαιότητας. Το μεταβλητό μέρος των μοντέλων δέχεται ως δεδομένα τις συνδέσεις της υπερδομής και ποσοτικούς παραμέτρους. Η οντολογία επομένως περιέχει έννοιες βιομάζας, ενδιάμεσων χημικών, τεχνολογιών, τελικών προϊόντων, καθώς και ποσοτικούς και ποιοτικούς παραμέτρους που σχετίζονται με αυτά. Συγκεκριμένα, η οντολογία περιέχει τέσσερις κλάσεις που περιγράφουν την υπερδομή με τα αντίστοιχα μέλη:

- Βιομάζα: καλαμπόκι, ροκανίδια, φυτικά έλαια, αστικά στερεά απόβλητα, ξύλο από λεύκες, σκληρό ξύλο σημύδας, άχυρο σίτου, ρύζι.
- Τεχνολογίες: βιοχημικές, θερμοχημικές και συμβατικές (π.χ. ζυμώσεις, αεριοποιήσεις, τρανσεστεροποιήσεις, αναμόρφωση, αφυδάτωση, υδρογονόλυση, πυρόλυση, υδρόλυση, πολυμερισμός κτλ)
- Ενδιάμεσα χημικά: αιθανόλη, αέριο σύνθεσης, βιοαέριο, μεθανόλη, γλυκερόλη, προπυλένιο, γλυκόζη, ξυλόζη, ξυλονικό οξύ, HMF, σορβιτόλη, ιτακονικό οξύ, αδιπικό, γλουκαρικό, βιοκάρβουνο, φουρφουρικό, ισοσορβιτικό κτλ.
- Προϊόντα: βιοντίζελ, εθυλένιο, αμμωνία, βουτανόλη, ακετόνη, προπυλένιο γλυκόλη, πολυαμίδια, πολυεστέρας, υδροτζελ, ξυλιτόλη, μαύρος άνθρακας, έλαιο πυρόλυσης, Pus, PEF, PEIF, βιο-PVC, πολυακρυλένιο. Κατάλοιπα PF κτλ.

Η οντολογία περιέχει επίσης υποκλάσεις που κατηγοριοποιούν περαιτέρω τα μέλη, όπως βιομάζα από ξύλο, βιομάζα φαγητού που είναι υποκλάσεις της βιομάζας. Ακόμη περιέχει μια κλάση με την απαραίτητη ποιοτική γνώση για τα συστατικά του βιοδιυλιστηρίου. Όπως γνώση για τη γεωγραφική περιοχή, και πως διαμορφώνεται η διαθεσιμότητα της βιομάζας από αυτή. Τα μέλη συνδέονται με τις σχέσεις που αναλύθηκαν στην ενότητα της μεθοδολογίας για τη σύνθεση των υπερδομών. Η οντολογία χτίστηκε με σκοπό να είναι αρκετά γενικευμένη, ώστε πιθανές νέες αλλαγές στην υπερδομή ή προσθήκη περισσότερων βιοδιυλιστηρίων να είναι δυνατές. Έτσι εξασφαλίζεται η επαναληψιμότητα χρήσης της οντολογίας.

Το πλαίσιο της διεπιφάνειας του χρήστη που εκφράζει αυτή την εφαρμογή βασίζεται στην αφαιρετική σύλληψη του τομέα των Βιοδιυλιστηρίων. Οι έννοιες προβλήματος που αφορούν τη συγκεκριμένη εφαρμογή αφορούν επιλογές βέλτιστης τροφοδοσίας, προϊόντων, του αντίστοιχου κερδοφόρου μονοπατιού παραγωγής, σύγκριση περιπτώσεων παραγωγής για το Βιοδιυλιστήριο. Οι έννοιες γνώσης που σχετίζονται με τις έννοιες προβλήματος είναι οι υπερδομές, τα μαθηματικά μοντέλα, το κόστος, οι τιμές, οι ποσότητες, η γεωγραφική περιοχή. Οι ανάλογες έννοιες μοντέλου αφορούν μοντέλα GAMS που δίνουν απαντήσεις στις έννοιες προβλήματος και δέχονται ως δεδομένα τις έννοιες γνώσης. Τέλος οι έννοιες αποτελέσματος χωρίζονται σε τύπου δεδομένων και οπτικών, δηλαδή τα αποτελέσματα των μοντέλων διατίθενται στο χρήστη είτε αναλυτικά σε αρχεία Excel είτε αναπαριστώνται συνοπτικά με γραφικά μέσα μέσω της διεπιφάνειας. Οι έννοιες αυτές ενσωματώνονται στη διεπιφάνεια του χρήστη με τη μορφή οντολογιακών μοντέλων και μοντέλων βελτιστοποίησης, εξασφαλίζοντας τη φυσική γλώσσα επικοινωνίας με το χρήστη. Η διεπιφάνεια του χρήστη με τις ενσωματωμένες δράσεις απεικονίζεται στο Σχήμα 19.

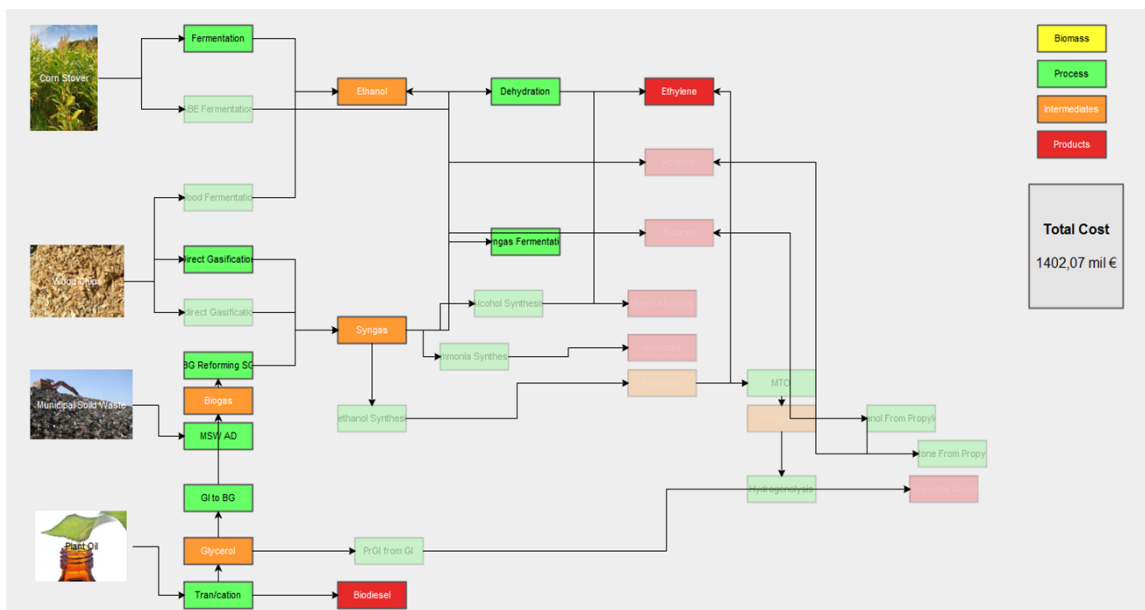


Σχήμα 19. Πλαίσιο-διεπιφάνεια χρήστη για την εφαρμογή του Βιοδιυλιστηρίου

Για να κατανοηθεί σε μεγαλύτερο βαθμό η εφαρμογή της μεθοδολογίας θα εξεταστεί παρακάτω η αλληλεπίδραση του χρήστη με τη διεπιφάνεια και οι δράσεις που ενεργοποιούνται στο υπόβαθρο. Θεωρούμε την απλή περίπτωση που ο στόχος του χρήστη είναι να συγκρίνει τη βιομάζα από καλαμπόκι, ροκανίδια, φυτικά έλαια, αστικά στερεά απόβλητα σε μια συγκεκριμένη περιοχή με κριτήριο το κόστος για το ποιο είναι το βέλτιστο μονοπάτι παραγωγής. Η απάντηση δηλαδή στην απλή ερώτηση «Τι με συμφέρει να παράγω και πως?». Ο χρήστης εισάγει στη διεπιφάνεια τις συγκεκριμένες βιομάζες προς εξέταση, το σενάριο της βελτιστοποίησης από άποψη κόστους και προαιρετικά την περιοχή. Οι υπόλοιπες διαδικασίες μέχρι την προβολή του αποτελέσματος εκτελείται στο υπόβαθρο της επιφάνειας. Αναλυτικά οι διαδικασίες αυτές είναι οι εξής:

- i. Ενεργοποιείται ο αλγόριθμος ερωτήσεων SPARQL προς την οντολογία. Για τις δοσμένες βιομάζες ενεργοποιούνται διαδοχικές ερωτήσεις τριπλέτας που θα εξάγουν την υπερδομή που σχηματίζουν. Έτσι θα προκύψουν όλα τα ενδιαμέσως χημικά, οι τεχνολογίες, τα προϊόντα που σχετίζονται με τις συγκεκριμένες

- βιομάζες. Τα μέλη αυτά συγκεντρώνονται και αποθηκεύονται σε λίστες μεταβλητών στη κατάλληλη μορφή επεξεργασίας τους από τα μοντέλα.
- ii. Στη συγκεκριμένη περίπτωση για την επίλυση αρκεί η χρήση ενός μοντέλου GAMS. Επιλέγεται επομένως η μορφή μοντέλου που ικανοποιεί το κριτήριο του χρήστη και αρχίζει η επεξεργασία του. Επικαλείται το μοντέλο μέσω του κώδικα και εντοπίζεται ο σταθερός κορμός καθώς και το μεταβλητό μέρος. Κατόπιν, με εντολές αναζήτησης και ταυτοποίησης ανιχνεύονται μέσα στο κώδικα του μοντέλου τα σημεία που απαιτούν τροποποιήσεις από τα δεδομένα της ερώτησης. Στη συνέχεια, τα μέλη και οι συνδέσεις της υπερδομής που προκτοποθετούνται στα σημεία αυτά του κώδικα με εντολές συγγραφής και αντικατάστασης. Μετά το τέλος της επεξεργασίας προκύπτει ένα έτοιμο για εκτέλεση μοντέλο που δεν απαιτεί επέμβαση του χρήστη.
  - iii. Ακολούθως δίνεται στο χρήστη η επιλογή για αυτόματη εκτέλεση του μοντέλου και προβολή των αποτελεσμάτων. Το μοντέλο εκτελείται και τα αποτελέσματα του αποθηκεύονται σε αρχεία excel. Παράλληλα το πλαίσιο διαβάζει τα αρχεία αυτά και παρουσιάζει γραφικά κάποια από τα αποτελέσματα στο χρήστη μέσω μιας βιβλιοθήκης γραφημάτων, προσδίδοντας πιο έντονο χαρακτήρα φυσικής γλώσσας (βλέπε Σχήμα 20). Στο γράφημα αυτό απεικονίζονται τα βέλτιστα μονοπάτια παραγωγής (δηλαδή τα προϊόντα που είναι περισσότερο κερδοφόρα) για τις επιλεγμένες βιομάζες καθώς και το συνολικό κόστος της όλης εγκατάστασης και παραγωγικής διαδικασίας.

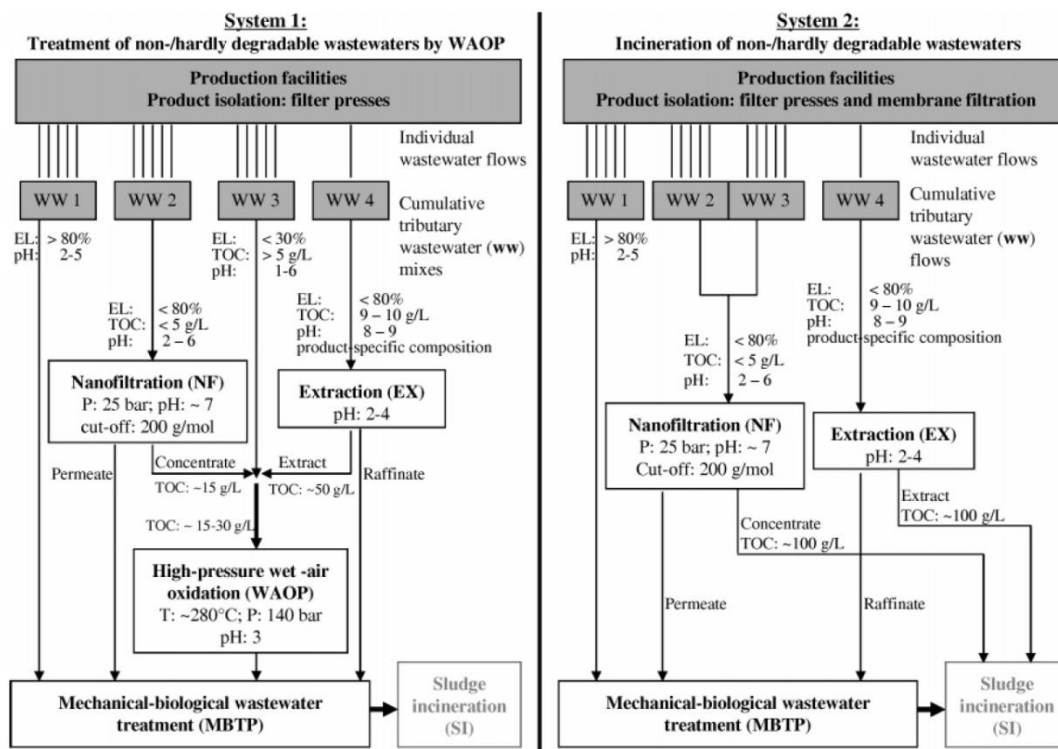


Σχήμα 20. Οπτική απεικόνιση των αποτελεσμάτων από τη διεπιφάνεια χρήστη

Στο πλαίσιο που έχει σχεδιαστεί για τη συγκεκριμένη εφαρμογή ενσωματώνονται επίσης περισσότερες λειτουργίες (όπως διάφορα αρχεία pdf που σχετίζονται με τους πόρους και τις τεχνολογίες του βιοδιυλιστηρίου) καθώς και πιο σύνθετα κριτήρια επιλογών για το χρήστη (όπως επιλογή συγκεκριμένων προϊόντων με βάση συγκεκριμένες βιομάζες, εξέταση ως προς περιβαλλοντικά κριτήρια ή κριτήρια ενέργειας, επιλογή παραπροϊόντων, επιλογή ενδιάμεσων χημικών ως τελικών προϊόντων).

## 4.2. Εφαρμογή για σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού

Τα συστήματα διαχείρισης αποβλήτων αποτελούνται από ένα πολύπλοκο δίκτυο δεδομένων, γνώσεων και μοντέλων που υπολογίζουν και επεξεργάζονται διάφορες παραμέτρους. Τα διάφορα μοντέλα των διεργασιών που συνθέτουν το δίκτυο αλληλεπιδρούν ώστε να δώσουν πλήρη και ολοκληρωμένες απαντήσεις. Η επιλογή των μοντέλων και η πορεία επεξεργασίας που θα ακολουθηθεί εξαρτώνται από τις διάφορες παραμέτρους και τις προδιαγραφές του προβλήματος. Η μεθοδολογία που έχει παρουσιαστεί ευημερεί για την επίλυση των προβλημάτων κατανομής και λήψης αποφάσεων αυτών των συστημάτων. Συγκεκριμένα η μεθοδολογία εφαρμόστηκε για ένα βιομηχανικό σύστημα καθαρισμού αποβλήτων νερού του χημικού τομέα, που αξιολογεί την περιβαλλοντική επίδραση (Annette Koehler et al., 2007). Τα μοντέλα που περιγράφουν το σύστημα υπολογίζουν παραμέτρους καταγραφής του κύκλου ζωής ως συνάρτηση της σύνθεσης των αποβλήτων και των εφαρμοσμένων τεχνολογιών. Το δίκτυο του συστήματος (καθαρισμού αποβλήτων νερού) απεικονίζεται στο σχήμα και αποτελείται από τις διεργασίες νανοφιλτραρίσματος, εκχύλισης, οξείδωση με υγρό αέρα υψηλής πίεσης, μηχανική-βιολογική κατεργασία αποβλήτων νερού, αποτέφρωση λάσπης. Στο Σχήμα 21 παρατηρούνται δύο συστήματα που διαφοροποιούνται με το αν περιλαμβάνεται ή όχι η οξείδωση με υγρό αέρα υψηλής πίεσης (στην ευχέρεια του χρήστη). Στη κάθε διεργασία του δικτύου προηγούνται κάποιες προκατεργασίες (π.χ. για προσαρμογή του pH) και γίνεται χρήση διάφορων βοηθητικών παροχών (π.χ. ηλεκτρισμός, νερό, διαλύτες, αέρας, ατμός κτλ.) ανάλογα με τη σύνθεση και τα χαρακτηριστικά του αποβλήτου. Στόχος της μεθοδολογίας είναι η σύνθεση του δικτύου και η επιτυχής αυτοματοποιημένη κατανομή των αποβλήτων, τεχνολογιών, ρευμάτων, βοηθητικών υλικών και οι αντίστοιχες παράμετροι τους.



Σχήμα 21. Σύστημα διαχείρισης αποβλήτων νερού, TOC: συνολικός οργανικός άνθρακας («total organic carbon»), EL: εγκλεισμός του TOC από βιολογική επεξεργασία στις δοκιμές Zahn-Wellens.

Αρχικά θα αναλύσουμε πως εφαρμοζόταν το εξεταζόμενο σύστημα αποβλήτων νερού, ώστε να κατανοηθεί καλύτερα η συμβολή και η σημασία της μεθοδολογίας. Συγκεκριμένα, αλλάζουν τα εξής:

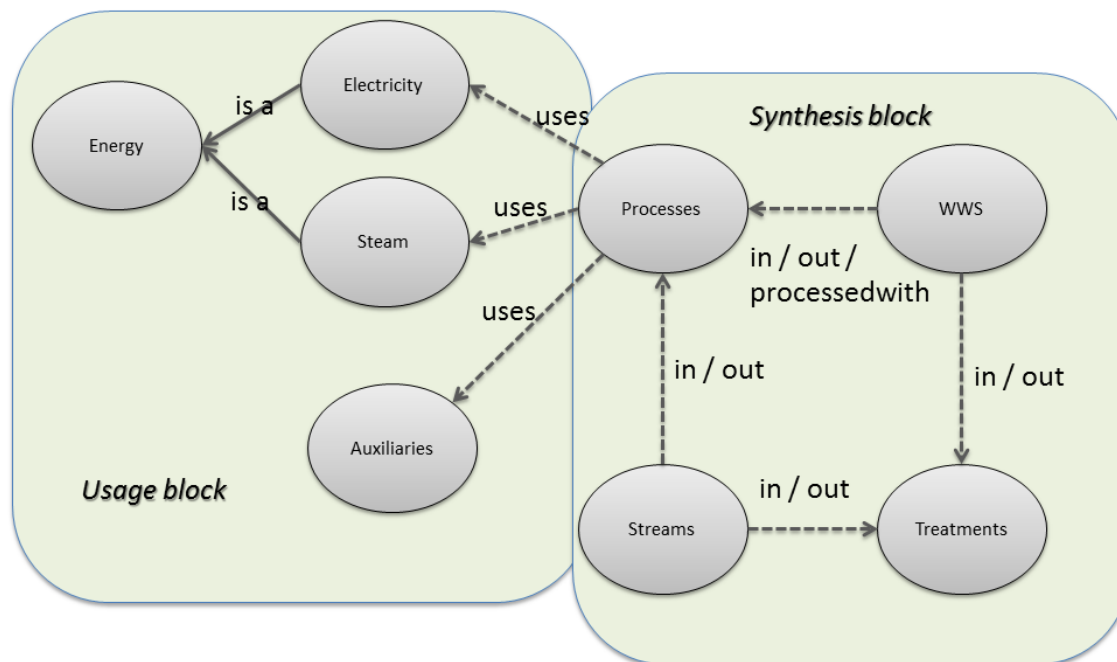
- i. Το μοντέλο της μηχανικής-βιολογικής διεργασίας εκτελείται ταυτόχρονα δύο φορές με προσαρμογή του pH και χωρίς, ανεξαρτήτως αν απαιτείται ή όχι.
- ii. Χρησιμοποιούνται όλοι οι βοηθητικοί διαλύτες για την προσαρμογή του pH στο μοντέλο (NaOH, CaO, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) χωρίς να λαμβάνεται υπόψη αν το εισερχόμενο ρεύμα είναι όξινο, βασικό ή ουδέτερο. Με αποτέλεσμα της μείωση της ακρίβειας του αποτελέσματος.
- iii. Το σύστημα δεν είναι πλήρως αυτοματοποιημένο και δεν εκτελείται καθολικά. Η κάθε διεργασία χρησιμοποιεί στο αντίστοιχο μοντέλο της ως δεδομένα εισόδου την έξοδο του μοντέλου της διεργασίας που προηγείται. Αντιθέτως η κάθε διεργασία εξετάζεται μεμονωμένα, και όχι το σύστημα ως σύνολο. Δεν υπάρχει ουσιαστική σύνδεση μεταξύ των διεργασιών, δηλαδή των μοντέλων, ενώ το σύστημα προϋποθέτει τη ταυτόχρονη επεξεργασία των μοντέλων.
- iv. Ο χρήστης καλείται να εισάγει την ατομική σύνθεση του αποβλήτου.

- v. Χρήση αρχείου excel για την εισαγωγή των δεδομένων, και σύνδεση του με τα μοντέλα MATLAB μέσω Python. Δεν γίνεται χρήση ενός πλαισίου φυσικής γλώσσας ώστε να είναι προσβάσιμη η γνώση και τα αποτελέσματα σε μη ειδικούς χρήστες.

Τα δύο πρώτα εξασφαλίζονται με τη χρήση των οντολογιών. Το τρίτο επιτυγχάνεται με το συνδυασμό οντολογιών και της προγραμματιστικής γλώσσας Java. Η αυτοματοποίηση ανάκτησης της ατομικής σύνθεσης του αποβλήτου από τα μόρια που περιέχει, επιτυγχάνεται με τη χρήση της βιβλιοθήκης OpenBabel. Το τελευταίο ενσαρκώνεται από το προγραμματιστικό πλαίσιο σχεδιασμένο με χρήση φυσικής γλώσσας.

Με βάση τη μεθοδολογία, οι έννοιες προβλήματος στο συγκεκριμένο σύστημα αφορούν τη μελέτη της περιβαλλοντικής επιρροής των αποβλήτων νερού. Οι έννοιες γνώσης που σχετίζονται είναι η σύνθεση του δικτύου, παράμετροι των διεργασιών, χαρακτηριστικά των αποβλήτων, βοηθητικές παροχές, μαθηματικά μοντέλα. Τα μοντέλα που απαιτούνται είναι τύπου MATLAB, των οποίων το μεταβλητό μέρος εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά του αποβλήτου, ενώ το σταθερό αποτελείται από τους απαραίτητους μαθηματικούς υπολογισμούς. Τα αποτελέσματα των μοντέλων είναι παράγοντες κατανάλωσης και συντελεστές μεταφοράς των ρύπων των αποβλήτων για τις διεργασίες.

Η οντολογία που χρησιμοποιείται για την περιγραφή του συστήματος αποτελείται από τις κλάσεις Treatments (σύστημα), Processes (διεργασίες), Streams (ρεύματα), WWS (απόβλητα) που εκφράζουν τη σύνθεση του συστήματος και τις κλάσεις Auxiliaries, Emissions, Energy που περιλαμβάνουν αντίστοιχα τους διαλύτες, τις εκπομπές αερίων και τις ενεργειακές παροχές του συστήματος. Οι σχέσεις αντικειμένου in και out που χρησιμοποιούνται είναι αντίστοιχες των is processed with και has output της υπερδομής των βιοδιωλιστηρίων. Η διαφορά είναι ότι οι σχέσεις αυτές αναφέρονται σε ρεύματα (αντί για πρώτες ύλες, χημικά, προϊόντα) και εκφράζουν την είσοδο και έξοδο τους στις και από τις διεργασίες του συστήματος. Αντίστοιχα χρησιμοποιούνται και οι σχέσεις inwowaop και outwowaop όταν δεν λαμβάνεται υπόψη η οξείδωση στο σύστημα. Επιπλέον χρησιμοποιείται η σχέση uses που αφορά τους διαλύτες και τις βοηθητικές παροχές που απαιτούνται στις διεργασίες και η σχέση processedwith που περιγράφει όλες τις διεργασίες που συμπεριλαμβάνονται στην επεξεργασία των αποβλήτων. Όλες οι σχέσεις αντικειμένου που αναφέρθηκαν είναι ασυμμετρικές και μη αντανακλαστικές. Οι κλάσεις της οντολογίας καθώς και οι σχέσεις αντικειμένου για την περιγραφή του συστήματος αποβλήτων απεικονίζονται στο Σχήμα 22.



Σχήμα 22. Οντολογιακές κλάσεις και σχέσεις αντικειμένου για το σύστημα αποβλήτων

Η οντολογία περιέχει επίσης και πολλές σχέσεις τύπου δεδομένων ποσοτικές (όπως pH, περιεκτικότητα νερού, TOC, EL, ποσότητες διαλυτών, αποκλίσεις) και ποιοτικές (οξύτητα, αν χρειάζεται ή όχι προσαρμογή του pH, εξαρτήσεις, μονάδες μέτρησης). Οι συγκεκριμένες σχέσεις δίνουν τη δυνατότητα διαμόρφωσης της σύνθεσης και φιλτραρίσματος της δομής ανάλογα με τις συνθήκες του εξεταζόμενου προβλήματος. Ο τομέας και το εύρος των σχέσεων αυτών αναπαριστώνται στο Σχήμα 23.

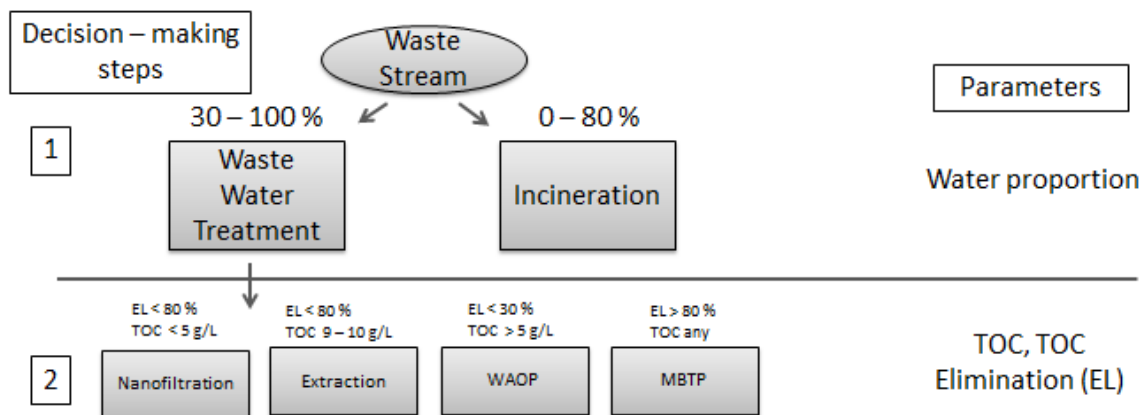


Domain	Range
Energy, Auxiliaries	Literal
Streams, WWS	integer
Streams, WWS	integer
Treatments	
Treatments	integer
Treatments	integer
Auxiliaries	Literal
Streams, WWS	Literal
Streams, WWS	Literal
Streams, WWS	Literal
Streams, WWS, Processes	
Streams, WWS, Processes	integer
Streams, WWS, Processes	integer
Streams, WWS, Processes	integer
Streams, WWS	integer
Streams, WWS	integer
Streams, WWS	integer
Streams, WWS	integer
Streams, WWS	integer

Σχήμα 23. Τομέας και εύρος των σχέσεων τύπου δεδομένων της οντολογίας

Το οντολογιακό αυτό μοντέλο δίνει τη δυνατότητα της σύνθεσης του συστήματος καθαρισμού των αποβλήτων νερού καθώς και της αυτοματοποίησης του μονοπατιού επεξεργασίας που πρέπει να ακολουθηθεί ανάλογα με την περιεκτικότητα του αποβλήτου σε νερό, το οργανικό του φορτίο (TOC καθώς και τον εγκλεισμό του TOC (EL). Στη συνέχεια θα δούμε πως το μοντέλο αυτό χρησιμοποιείται για το σύστημα αποβλήτων.

Αρχικά τα απόβλητα ανάλογα με την περιεκτικότητά τους σε νερό θα επεξεργαστούν απευθείας με αποτέφρωση ή θα ακολουθήσουν το σύστημα καθαρισμού της Koehler (Annette Koehler et al., 2007) ή θα επεξεργαστούν και με τους δύο τρόπους. Η απόφαση αυτή καθορίζεται στο μοντέλο μέσω της σχέσης τύπου δεδομένων `haswaterpercentage`. Θεωρούμε ενδεικτικά τα επιθυμητά όρια 0-80% για την επεξεργασία με αποτέφρωση και 30-100% με το σύστημα καθαρισμού. Οπότε ανάλογα με τα δεδομένα του προβλήματος διαμορφώνεται αναλόγως και η διάταξη που προκύπτει από την οντολογία. Όταν επιλέγεται το σύστημα καθαρισμού της Koehler, το επόμενο βήμα για την επιλογή του μονοπατιού επεξεργασίας που θα ακολουθήσει το απόβλητο εξαρτάται από τις παραμέτρους TOC και EL. Η κάθε διεργασία έχει κάποια όρια τιμών για αυτές τις παραμέτρους που ενδείκνυνται για επεξεργασία αποβλήτων και εκφράζονται μέσω των ιδιοτήτων τύπου δεδομένων. Ανάλογα με τα χαρακτηριστικά των αποβλήτων εισόδου θα επιλεγθούν και οι κατάλληλες διεργασίες. Κατόπιν των επιλογών αυτών προκύπτει το κατάλληλο δίκτυο καθαρισμού, μέσω των σχέσεων της οντολογίας. Στο Σχήμα 24 φαίνεται η διαδικασία λήψης αποφάσεων μέσω της οντολογίας για το σύστημα ανάλογα με τα δεδομένα εισαγωγής από το χρήστη (περιεκτικότητα νερού, TOC, EL).



Σχήμα 24. Βήματα λήψης αποφάσεων στην οντολογία ανάλογα με τους παραμέτρους των δεδομένων εισαγωγής

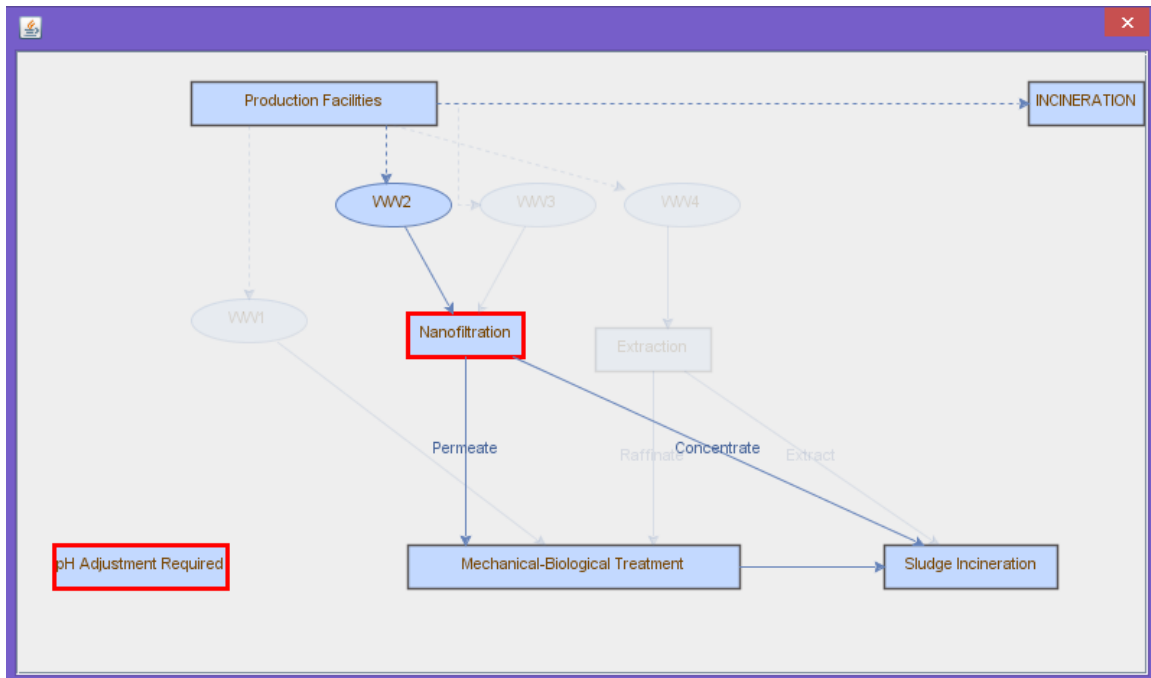
Παράλληλα με τη διαδικασία της σύνθεσης και της επιλογής του μονοπατιού επεξεργασίας, εξετάζεται και η οξύτητα/pH του κάθε ρεύματος πριν την εισαγωγή του στις διεργασίες ώστε να καθοριστεί αν απαιτείται προεπεξεργασία για την προσαρμογή του pH. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω των ποσοτικών σχέσεων της οντολογίας για το pH (equalsph, lowerlimph, upperlimph), ενώ αν δεν υπάρχουν διαθέσιμα ποσοτικά δεδομένα μέσω των ποιοτικών σχέσεων acidity (acid, basic, neutral) και phadjust (yes, no).

Για την καλύτερη κατανόηση της διαδικασίας θα εξετάσουμε ένα παράδειγμα στο προγραμματιστικό πλαίσιο που διαμορφώθηκε για τα συστήματα καθαρισμού αποβλήτων. Τα δεδομένα που πρέπει να εισάγει ο χρήστης απεικονίζονται στο Σχήμα 25. Τα πεδία που σημαδεύονται από ένα κύκλο με εσωτερικό χρωματισμό σχετίζονται με την οντολογία. Με κενό κύκλο απεικονίζονται τα πεδία εκείνα που δεν χρειάζονται περαιτέρω και οι τιμές τους τοποθετούνται απευθείας στα μοντέλα. Τα πεδία δίπλα στο ρόμβο επεξεργάζονται με την βιβλιοθήκη OpenBabel. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα του σχήματος, ο χρήστης εισάγει τιμές για τις παραμέτρους water proportion (περιεκτικότητα αποβλήτου σε νερό), pH, TOC, EL που επεξεργάζονται από το οντολογιακό μοντέλο, καθώς και τη μοριακή σύσταση του αποβλήτου (αιθανόλη) σε μορφή SMILES («Simplified molecular-input line-entry system»), την παροχή, την πυκνότητα και τις παραμέτρους AOX («adsorbable organic halogens») και BOD («Biochemical Oxygen Demand»). Οι παράμετροι αυτοί επιλέχθηκαν γιατί συμπληρώνουν το μεταβλητό μέρος των μοντέλων του συστήματος.

Water Proportion (%)	50		
pH value	9		
TOC value (kg/m <sup>3</sup> )	4		
Elimination of TOC (%)	40		
Flow Rate (m <sup>3</sup> /h)	50		
Density (kg/m <sup>3</sup> )	100		
Molecule (SMILES) - % w/w	Find	CCO	50
Multiple molecules (SMILES)	Add More SMILES		
Additional Groups	Add Groups		
AOX (mg/L)	0		
BOD (mg/L)	0		
Include Wet-Air Oxidation Technology?	<input type="checkbox"/>		

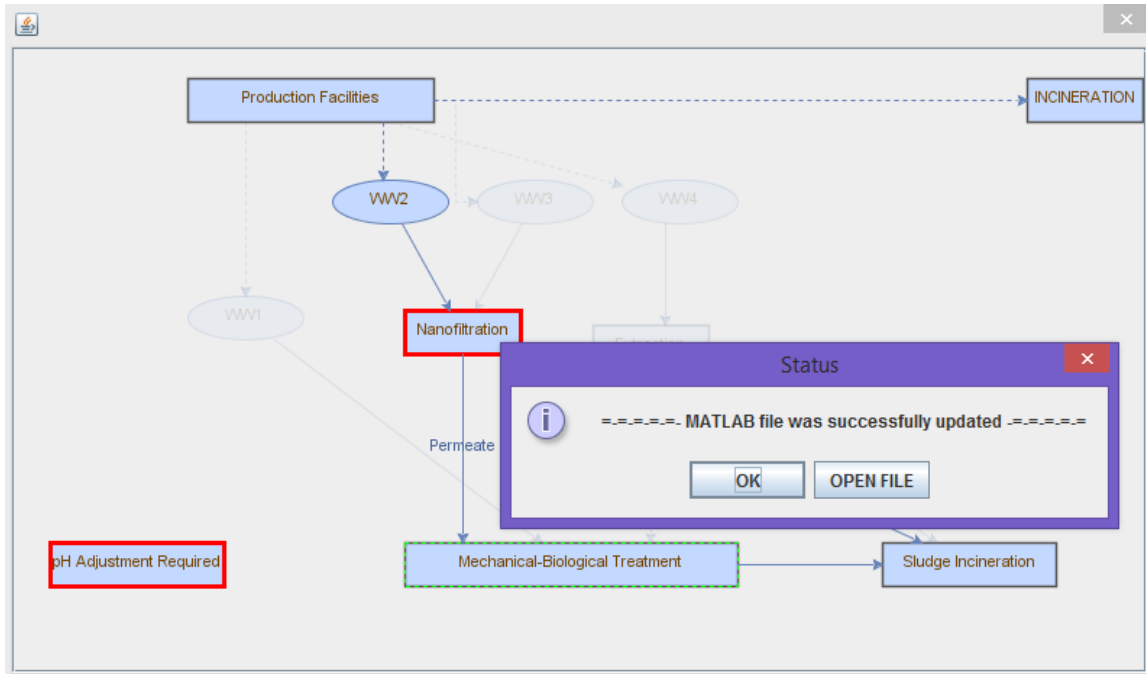
Σχήμα 25. UI για την εισαγωγή των απαραίτητων δεδομένων

Κατόπιν εισαγωγής των απαραίτητων δεδομένων, εκτελούνται ερωτήσεις στην οντολογία και επεξεργάζονται τα δεδομένα. Προκύπτει η πορεία που πρέπει να ακολουθήσει το απόβλητο με τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά (Σχήμα 26).



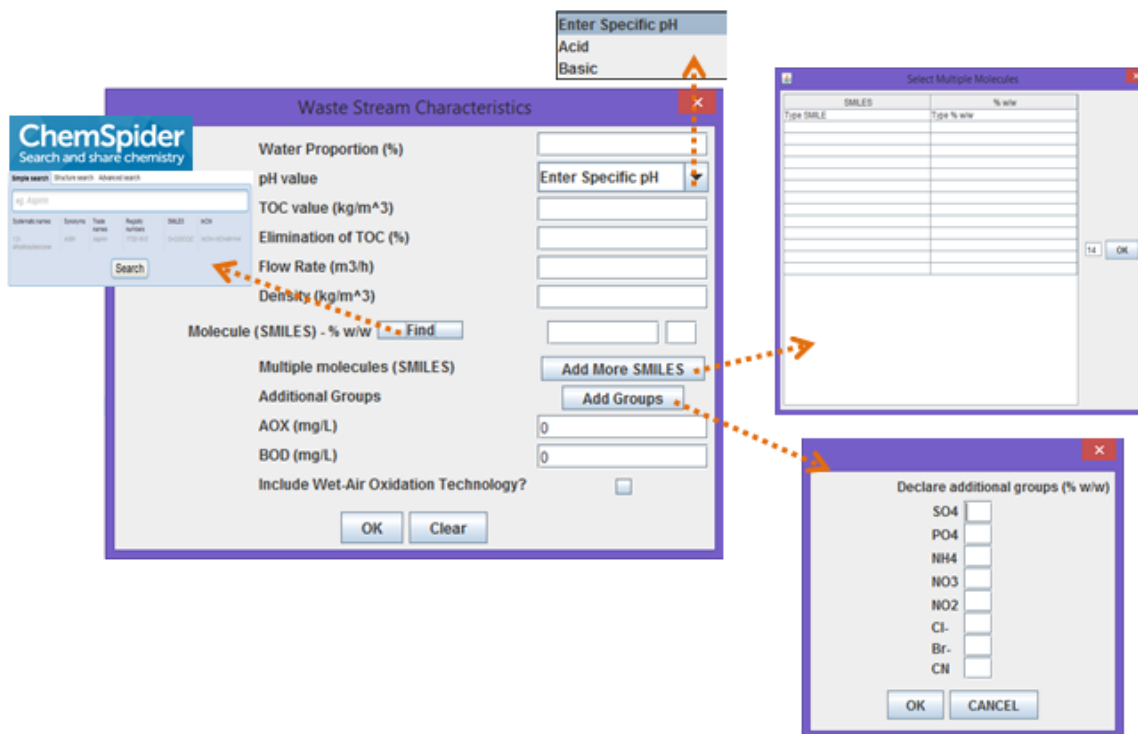
Σχήμα 26. Επιλεγμένο μονοπάτι επεξεργασίας για το απόβλητο του παραδείγματος

Κάθε παραλληλόγραμμο στο σχήμα απεικονίζει μια διεργασία. Με κόκκινο χρωματίζονται οι διεργασίες που απαιτούν προσαρμογή του pH των ρευμάτων εισόδου τους. Όταν ο χρήστης επιλέγει πάνω σε κάποιο από τα παραλληλόγραμμα, δηλαδή τη διεργασία, καλείται το αντίστοιχο μοντέλο της διεργασίας και συμπληρώνεται με τα κατάλληλα δεδομένα που προκύπτουν από την οντολογία στη κατάλληλη μορφή. Για παράδειγμα, επιλέγεται με διπλό κλικ η μηχανική-βιολογική επεξεργασία («Mechanical-Biological Treatment») (Σχήμα 27).



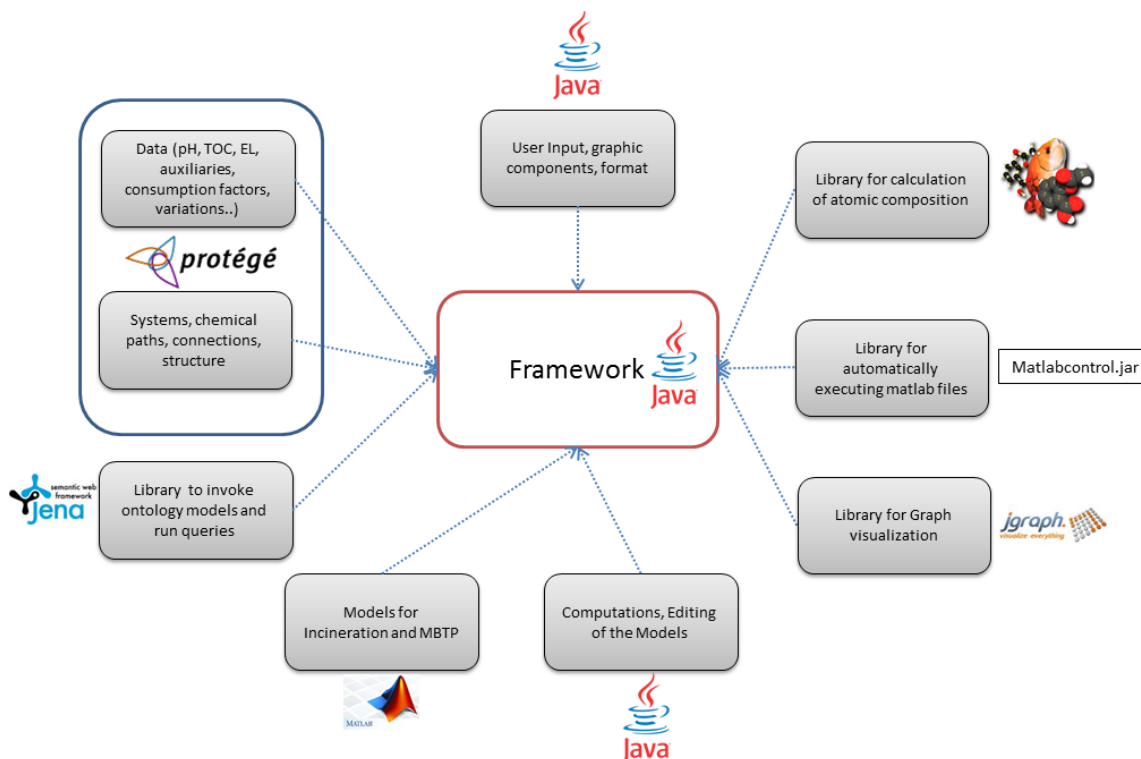
Σχήμα 27. Επιλογή διεργασίας και ανάπτυξη του μοντέλου

Η διεπιφάνεια του χρήστη (UI) με όλες τις δυνατότητες και επιλογές χρήσης των συστατικών της απεικονίζεται στο Σχήμα 28. Ο χρήστης μπορεί να δώσει ποιοτικές ή ποσοτικές τιμές για το pH, έχει τη δυνατότητα να κατευθυνθεί στο διαδίκτυο για την εύρεση συγκεκριμένων SMILES, να ορίσει πολλαπλά SMILES, δηλαδή πολλαπλές μοριακές ενώσεις στα απόβλητα, καθώς και συγκεκριμένες πρόσθετες χημικές ομάδες.



Σχήμα 28. Διεπιφάνεια χρήστη (UI) και οι λειτουργίες των συστατικών της

Τα δεδομένα της χημικής σύστασης του αποβλήτου (τα χημικά μόρια, χημικές ομάδες) στη μορφή SMILES διαβάζονται από τη βιβλιοθήκη OpenBabel μέσω του προγραμματιστικού πλαισίου ώστε να υπολογίσει τις μοριακές μάζες και την ατομική σύσταση του αποβλήτου, που είναι απαραίτητα για την εκτέλεση του μοντέλου. Τα δεδομένα που προκύπτουν μεταφέρονται στα μοντέλα μέσω του πλαισίου. Όλες οι δράσεις, λειτουργίες, μοντέλα, δεδομένα που ενσωματώνονται στο πλαίσιο του συστήματος απεικονίζονται στο Σχήμα 29.



Σχήμα 29. Δράσεις, λειτουργίες, μοντέλα και δεδομένα που ενσωματώνονται στο πλαίσιο

Στη συγκεκριμένη εφαρμογή έγιναν οι εξής υποθέσεις:

- Το ποσοστό του νερού του αρχικού ρεύματος του αποβλήτου παραμένει ίδιο καθόλη την επεξεργασία του συστήματος.
- Το εύρος του ποσοστού του νερού που είναι επιθυμητό για την επεξεργασία των αποβλήτων από το σύστημα καθαρισμού Koehler και την αποτέφρωση εκτιμήθηκε θεωρητικά.
- Πολλαπλά ρεύματα από διαφορετικές πηγές που εισέρχονται σε μια διεργασία θεωρούνται ένα ενιαίο ρεύμα.
- Αγνοούμε τις πιθανές μεταβολές που ενδεχομένως προκύπτουν στα σημεία ανάμιξης.
- Δεν είναι διαθέσιμα όλα τα μοντέλα όλων των διεργασιών του συστήματος αλλά για λόγους αναπαράστασης του προβλήματος καθώς και μελλοντικού σκοπούς, τα συμπεριλαμβάνουμε στην απεικόνιση.

---

## **ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ & ΣΥΖΗΤΗΣΗ**

---



## 5. Συμπεράσματα και συζήτηση

Η συγκεκριμένη διπλωματική εργασία παρουσιάζει μια νέα προσέγγιση στην μοντελοποίηση μέσω φυσικής γλώσσας, που υποστηρίζεται από την οντολογιακή μηχανική και τον προγραμματισμό. Η προσέγγιση υποδεικνύει πως τα προβλήματα και τα μοντέλα μπορούν να συλληφθούν αφαιρετικά και να ενσωματωθούν από την οντολογιακή μηχανική. Η ανάγκη εδραίωσης μιας κοινής γλώσσας ανάμεσα στους ειδικούς της μοντελοποίησης και των τελικών χρηστών αποδεικνύει ότι η προτεινόμενη μεθοδολογία έχει μεγάλη δυναμική. Επίσης, περιγράφεται η σημασία της επικοινωνίας ανάμεσα στους ειδικούς διαφορετικών περιοχών και πεδίων.

Η διαθέσιμη γνώση και τα μοντέλα στο επιστημονικό πεδίο χρειάζονται ένα τρόπο αξιοποίησης και πρόσβασης για τους χρήστες ξεπερνώντας την απαιτούμενη εξειδίκευση. Ως εκ τούτου, η μοντελοποίηση μέσω φυσικής γλώσσας επιλέγεται, ενισχύοντας την επαναληψιμότητα χρήσης και τη κοινή χρήση. Η προσέγγιση προτείνει τη χρήση οντολογιών λόγω της επαναληψιμότητας χρήσης τους, της ικανότητας τους να μεγαλώνουν και της ενσωματωμένης τεκμηρίωσης τους που αναπτύσσουν τις υπερδομές επιλεκτικά. Ακόμη γίνεται χρήση του προγραμματισμού για τη δημιουργία μιας διεπιφάνειας χρήσης βασισμένη στη φυσική γλώσσα, για το συντονισμό των δράσεων που ενσωματώνονται και για τη σύνδεση δεδομένων και γνώσης. Η μελέτη παρουσιάζει μια μεθοδολογία για την αφαιρετική σύλληψη της διεπιστημονικής γνώσης, και ακόμη τη μετάφραση των σύνθετων όρων σε καθημερινούς για το πεδίο των Βιοδυλιστηρίων. Η σύνδεση των όρων με πολύπλοκα μαθηματικά μοντέλα επιτρέπει τη κοινή χρήση και επαναληψιμότητα της γνώσης, καθώς και την αυτοματοποιημένη ανάπτυξη.

Η μελλοντική ανάπτυξη της μελέτης στο αντικείμενο κινείται σε τρεις κατευθύνσεις:

- I. Βελτιστοποίηση: χρήση της προσέγγισης για αποσύνθεση των προβλημάτων βελτιστοποίησης. Περαιτέρω δουλειά σε εξέλιξη αποτελεί η χρήση της σε μεγαλύτερα και πιο πολύπλοκα προβλήματα. Τα πιο πολύπλοκα προβλήματα απαιτούν συνδυασμό πολλαπλών διαφορετικών τύπων μοντέλων, αυτοματοποίηση της μεταφοράς των σχέσεων εισόδου-εξόδου μεταξύ των διαφορετικών μοντέλων. Για παράδειγμα, η λύση ενός προβλήματος μπορεί να απαιτεί τη χρήση μοντέλων MATLAB, GAMS. Το μοντέλο GAMS χρειάζεται δεδομένα από τα αποτελέσματα του μοντέλου MATLAB. Το πλαίσιο αναλαμβάνει το ρόλο της διαχείρισης και της αυτοματοποίησης της διαδικασίας, ενώ η οντολογία παρέχει τα δομημένα δεδομένα.
- II. Σύνθεση άλλων συστημάτων: η μελέτη που είναι σε εξέλιξη περιλαμβάνει συστήματα όπως ενσωμάτωση διεργασιών, διαχείριση αποβλήτων, που απαιτούν διαχείριση γνώσης για τα πολύπλοκα δίκτυα των δεδομένων και των μοντέλων τους. Η πρόκληση εδώ έγκειται στην ενσωμάτωση των διαφόρων εφαρμογών από

διαφορετικά συστήματα και την έκφραση τους με τους ίδιους φυσικούς όρους, θεσπίζοντας ένα κοινό λεξιλόγιο για τα πεδία.

- III. Εφαρμογές για τα βιοδυλιστήρια: εξετάζεται η επέκταση της δουλειάς στη Βιομηχανική Συμβίωση όπου η έννοια του βιοδυλιστηρίου συνδυάζεται με κοινωνικά πλαίσια και ενσωματώνει και άλλα συστήματα.

Καθώς η έρευνα προοδεύει, συμβαίνουν αλλαγές και εξελίξεις στα υπάρχοντα μοντέλα ή ακόμη και αντικαθίστανται από καινούργια. Το γεγονός ότι η οντολογία και το πλαίσιο που θεσπίστηκαν χρειάζονται συνεχή ενημέρωση για τις ενδεχόμενες αλλαγές στα μοντέλα αποτελεί ένα ζήτημα προς εξέταση. Η μετατροπή της οντολογίας μέσω του πλαισίου σε ένα πιο δυναμικό εργαλείο προσθέτοντας τη δυνατότητα παρέμβασης και τροποποίησης της οντολογίας (με βάση τη φυσική γλώσσα) αποτελεί μια λύση. Παρόλαυτα, σε μεγάλη κλίμακα εξακολουθεί να αποτελεί πρόκληση. Μελλοντική εξέλιξη της παρούσας μελέτης που θα μπορούσε να ανταγωνιστεί στις γρήγορες αλλαγές στην μοντελοποίησης μεγάλης κλίμακας, είναι η εφαρμογή του «cloud computing» μέσω φυσικής γλώσσας. Οι οντολογίες έχουν τη δυνατότητα να ενσωματώνονται σε διαδικτυακούς διακομιστές, κάνοντας τη γνώση προσβάσιμη καθολικά, αποφεύγοντας την ανάγκη ύπαρξης ενός λογισμικού που απαιτεί συνεχή ενημέρωση από το χρήστη. Επιπλέον, οι λειτουργίες του πλαισίου μπορούν να ενσωματωθούν στο διαδίκτυο και να ενημερώνονται εύκολα ώστε να εξυπηρετούν όλους τους εμπλεκόμενους. Το «cloud computing» υποθέτει ότι οι ειδικοί των μοντέλων είναι πρόθυμοι να μοιραστούν τα μοντέλα τους και να συνεισφέρουν στη μετάφραση τους με φυσικούς όρους, που όμως δεν ισχύει σε όλες τις περιπτώσεις. Το όφελος από την έγχυση του «cloud computing» είναι η πολλαπλασιαζόμενη χωρητικότητα για ενδεχόμενα μοντέλα, καθώς και η διευκόλυνση της πρόσβασης.

Μια ακόμη περίπτωση που εξετάστηκε είναι η ενσωμάτωση της οντολογίας ως «plug-in» στους επεξεργαστές των μοντέλων (π.χ. GAMS) ώστε να υπάρχει άμεση επικοινωνία με τα μοντέλα χωρίς τη μεσολάβηση κάποιου πλαισίου. Ωστόσο, η τακτική αυτή αποκλείει το συνδυασμό διαφορετικών τύπων μοντέλων και τη γενικοποίηση της χρήσης της οντολογίας. Παρόλαυτα, για συγκεκριμένες μεμονωμένες εφαρμογές υπάρχει η δυνατότητα για ενημέρωση των μοντέλων με τα δεδομένα της οντολογίας απευθείας. Παρόλο που μελετήθηκε η συγκεκριμένη πρόταση, δεν εφαρμόστηκε στην πράξη διότι δεν αποτελούσε μέρος του κύριου στόχου της διατριβής.

Ανακεφαλαιώνοντας, το κίνητρο της προσέγγισης προήλθε από την απουσία της επικοινωνίας μοντέλων ανάμεσα στους ειδικούς και τελικούς χρήστες, καθώς και στην ανάγκη ανάκτησης και συνδυασμού της αφθονίας των δεδομένων και γνώσης που είναι απαραίτητα για την εκτέλεση των μοντέλων. Προτείνεται η λύση μέσω των οντολογιών και του προγραμματισμού για το πεδίο των βιοδυλιστηρίων και της διαχείρισης

αποβλήτων αλλά και χτίζονται οι βάσεις για τη γενικοποίηση της μεθοδολογίας. Το αντικείμενο μελέτης εμφανίζει σημαντική δυνητικότητα για περαιτέρω εξέλιξη.

---

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

---

## ΣΥΝΤΟΜΕΥΣΕΙΣ

**W3C** - World Wide Web Consortium

**RDF** - Resource Description Framework

**OWL** - Web Ontology Language

**XML** - Extension Markup Language

**RSFS** - Resource Description Framework Schema

**URI** - Uniform Resource Identifier

**SPARQL** - SPARQL Query Language for RDF

**OIS** - Ontology-based Information System

**OWA** - Open World Assumption

**CWA** - Closed World Assumption

**UI** - User Interface

**SOA** - Service Oriented Architecture

**API** - Application Programming Interface

**OOM** - Object-Ontology Mapping

**LCA** - Life Cycle Analysis

**ΣΔ** – Σύνθεση Διεργασιών

**ΜΣΔ** – Μηχανική Συστημάτων Διεργασιών

**PSE** – Process Systems Engineering

---

## **ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β**

---

## Java και βιβλιοθήκες

Η γλώσσα αντικειμενοφόρου προγραμματισμού Java χρησιμοποιήθηκε για το σχεδιασμό της διεπιφάνειας για το χρήστη και τη σύνδεση οντολογιών, μοντέλων και φυσικών όρων. Για την γραφή του κώδικα σε Java χρησιμοποιήθηκε ο επεξεργαστής Eclipse IDE στο περιβάλλον Java SE Runtime Environment 7. Ακόμη χρησιμοποιήθηκαν κάποιες βιβλιοθήκες (.jar) που καταγράφονται στον παρακάτω πίνακα.

Βιβλιοθήκη	Χαρακτηριστικά	Ρόλος στη διπλωματική
<b>OpenBabel</b>  <i>OpenBabelGUI v 2.3.2, Java library.</i> <a href="http://openbabel.org/wiki/Main_Page">http://openbabel.org/wiki/Main_Page</a>	Βιβλιοθήκη χημικών εργαλείων με χρήση πολλών γλωσσών για χημικά δεδομένα. Αναζητά, μετατρέπει, αναλύει ή αποθηκεύει δεδομένα από τη μοριακή μοντελοποίηση, τη χημεία, στερεά υλικά, βιοχημεία.	Στην εφαρμογή της διαχείρισης αποβλήτων. Ανάλυση της μοριακής σύνθεσης σε ατομική, εύρεση μοριακού βάρους, ανίχνευση χημικών ομάδων
<b>Jena</b>  <a href="https://jena.apache.org/">https://jena.apache.org/</a>	Δημιουργία, διαχείριση οντολογιακών μοντέλων, σειριοποίηση τριπλετών σε μορφές RDF/XML, Turtle.	Ανάκτηση του οντολογιακού μοντέλου, επεξεργασία, εκτέλεση ερωτημάτων SPARQL
<b>JGraph</b>  <a href="http://www.jgraph.com/">http://www.jgraph.com/</a>	Εργαλείο για το σχεδιασμό και την απεικόνιση γραφημάτων, διαγραμμάτων μέσω Java.	Προβολή της υπερδομής γραφικά όπως προκύπτει από τη βελτιστοποίηση του μοντέλου.
<b>SwingX</b>  <a href="https://swingx.java.net/">https://swingx.java.net/</a>	Επιπλέον εφαρμογές γραφικών, επέκταση δυνατοτήτων των συστατικών GUI της Java.	Σχεδιασμός της διεπιφάνειας του χρήστη

---

## **ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ**

---



**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [Α-Β]**

Aditya Kalyanpur, Bijan Parsia, Evren Sirin, Bernardo Cuenca Grau, James Hendler, 2005, «Swoop: A Web Ontology Editing Browser», *Web Semantics: Science, Services and Agents on the World Wide Web*, Volume 4, Issue 2, pp 144–153, DOI: 10.1016/j.websem.2005.10.001, Available at <http://code.google.com/p/swoop>.

Amit Sheth and Cartic Ramakrishnan. *Semantic (Web) Technology in Action: Ontology Driven Information Systems for Search, Integration and Analysis*. *IEEE Data Engineering Bulletin*, 26:40–48, 2003.

Annette Koehler, Stefanie Hellweg, Ercan Recan, Konrad Hungerbuehler, 2007, *Input-Dependent Life-Cycle Inventory Model of Industrial Wastewater-Treatment Processes in the Chemical Sector*, *Environ. Sci. Technol.*, 41, pp 5515-5522, Published on <http://pubs.acs.org>, DOI: 10.1021/es0617284.

Atkinson, C., Kühne, T. (2002). The role of metamodeling in MDA. In: *Proceedings of the Workshop in Software Model Engineering (in conjunction with UML'02, Dresden, Germany)*. Online available at <http://www.metamodel.com/wisme-2002/papers/atkinson.pdf>. Accessed January 2008.

Baader, F., Calvanese, D., McGuinness, D.L., Nardi, D., Patel-Schneider, P.F. (2003). *The Description Logic Handbook: Theory, Implementation, Applications*. Cambridge University Press, Cambridge.

Baliban, R.C., Elia, J.A., and Floudas, C.A. (2011) “Optimization framework for the simultaneous process synthesis, heat and power integration of a thermochemical hybrid biomass, coal, and natural gas facility”, *Computers and Chemical Engineering*, 35(9): 1647-1690.

Bechhofer, S., van Harmelen, F., Hendler, J., Horrocks, I., McGuinness, D., Patel-Schneider, L., Stein, L.A. (2004). *OWL Web Ontology Language Reference*. W3C Recommendation, 10 February 2004. Online available at <http://www.w3.org/TR/owl-ref/>. Accessed September 2007.

Boris Motik, Peter F. Patel-Schneider, and Bijan Parsia. *OWL 2 Web Ontology Language Structural Specification and Functional-Style Syntax [online]*. W3C Recommendation, W3C, 2009. Available at <http://www.w3.org/TR/2009/REC-owl2-syntax-20091027>.

Borst, W.N. (1997). *Construction of Engineering Ontologies for Knowledge Sharing and Reuse*. PhD Thesis, Centre for Telematics and Information Technology, University of Twente.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [B-D]**

Borst, P., Akkermans, J.M., Top, J.L. (1997): Engineering ontologies. *Int. J. Hum.-Comput. St.* 46, 365–406.

Brandt, S.C., Morbach, J., Miatidis, M., Theißen, M., Jarke, M., Marquardt, W. (2008a): An ontologybased approach to knowledge management in design processes. *Comp. Chem. Eng.* 32, 320–342.

Brandt, S.C., Fritzen, O., Jarke, M., List, T. (2008b). Goal-oriented information flow management in development processes. In: Nagl, M., Marquardt, W. (eds.): *Collaborative and Distributed Chemical Engineering*. Springer, Berlin, pp. 369–400.

Bylander, T., Chandrasekaran, B. (1988). Generic tasks in knowledge-based reasoning: the right level of abstraction for knowledge acquisition. In: Gaines, B., Boose, J. (eds.): *Knowledge Acquisition for Knowledge-Based Systems*. Academic Press, London, pp. 65–77.

Carsten Saathoff, Stefan Scheglmann, and Simon Schenk. Winter: Mapping RDF to POJOs revisited. In *Proceedings of the ESWC 2009 Demo and Poster Session, 2009*.

Chandrasekaran, B., Josephson, J.R. Benjamins, V.R. (1999). What are ontologies, and why do we need them? *IEEE Intell. Syst.* 14 (1), 20–26.

Chen, P.P. (1976). The entity-relationship model – toward a unified view of data. *ACM Transactions on Database Systems* 1 (1), 9–36.

Cherubini F, Ulgiati S. Crop residues as raw materials for biorefinery systems—A LCA case study. *Applied Energy*. 2010;87(1):47-57.

Cherubini F. The biorefinery concept: Using biomass instead of oil for producing energy and chemicals. *Energy Conversion and Management*. 2010;51(7):1412-21.

Clark JH. Green chemistry for the second generation biorefinery—sustainable chemical manufacturing based on biomass. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*. 2007;82(7):603-9.

Craig E. Kuziemsky and Francis Lau. A Four Stage Approach for Ontology-based Health Information System Design. *Artificial Intelligence In Medicine*, 50(3):133–148, 2010.

David Frankel. *Model Driven Architecture: Applying MDA to Enterprise Computing*. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA, 2002.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [D-F]**

Davis, R., Shrobe, H., Szolovits, P. (1993). What is a knowledge representation? *AI Mag.* 14 (1), 17–33.

Deborah L. McGuinness, Frank van Harmelen (2004). *OWL Web Ontology Language, W3C Recommendation*, Online available at <http://www.w3.org/TR/owl-features/>.

Demirbas A. Biorefineries: Current activities and future developments. *Energy Conversion and Management.* 2009;50(11):2782-801.

Demirbas A. Biorefinery technologies for biomass upgrading. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects.* 2010;32(16):1547-58.

Doerr, M., Hunter, J., Lagoze, C. (2003). Towards a core ontology for information integration. *J. Digit. Inf.* 4 (1), Article No. 169.

Donato Griesi, Maria Pazienza, and Armando Stellato. *Semantic Turkey: A Semantic Bookmarking Tool (System Description)*. In Enrico Franconi, Michael Kifer, and Wolfgang May, editors, *The Semantic Web: Research and Applications*, volume 4519 of *LNCS*, pages 779–788, Berlin, Heidelberg, 2007. Springer-Verlag.

EBI – European Bioinformatics Institute (2008). *Chemical Entities of Biological Interest (ChEBI)*. Online available at <http://www.ebi.ac.uk/chebi/>. Accessed June 2008.

Edward Kawas and Mark D. Wilkinson. *OWL2Perl: creating Perl modules from OWL class definitions.* *Bioinformatics*, 26(18):2357–8, 2010.

Eric Prud'hommeaux and Andy Seaborne. *SPARQL Query Language for RDF* [online]. *W3C Recommendation*, W3C, 2008. Available at <http://www.w3.org/TR/rdf-sparql-query>.

Evgeny Zolin. *Description Logic Complexity Navigator* [online]. Available at <http://www.cs.man.ac.uk/~ezolin/dl>.

Eyal Oren, Benjamin Heitmann, and Stefan Decker. *ActiveRDF: Embedding SemanticWeb Data into Object-oriented Languages.* *Journal of Web Semantics*, 6(3), 2011.

Fatih Demirbas M. Biorefineries for biofuel upgrading: a critical review. *Applied Energy.* 2009;86:S151-S61.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [F-G]**

Fensel, D., A. Schönegge, R. Groenboom, Wielinga, B.J. (1996). Specification and verification of knowledge-based systems. In: Gaines B.R., Musen M.A. (eds.): Proceedings of the 10th Banff Knowledge Acquisition for Knowledge-Based Systems Workshop. SRDG Publications.

Ferstl, O.K., Sinz, E.J. (2001). Grundlagen der Wirtschaftsinformatik, Bd. 1. Oldenbourg, München.

GeoNames (2007). GeoNames Ontology. Online available at <http://www.geonames.org/ontolog/>.

GO Consortium (2007): An Introduction to the Gene Ontology. Online available at <http://www.geneontology.org/GO.doc.shtml>. Accessed October 2007.

Gómez-Pérez, A., Fernández-López, M., Corcho, O. (2004). Ontological Engineering. Springer, Berlin.

Gruber, T.R. (1993). A Translation Approach to Portable Ontology Specifications. *Knowl. Acquis.* 5 (2), 199–220.

Gruber, T.R., Olsen, G. (1994). An Ontology for engineering mathematics. In: Doyle, J., Torasso, P., Sandewall, E. (eds.): Fourth International Conference on Principles of Knowledge Representation and Reasoning. Morgan Kaufmann, pp. 258–269.

Gruber, T.R. (1995). Toward principles for the design of ontologies used for knowledge sharing. *Int. J. Hum.-Comput. St.* 43 (5/6), 907–928.

Guarino, N., Boldrin, L. (1993). Ontological requirements for knowledge sharing. In: Skuce, D. (ed.): Proceedings of the IJCAI'95 Workshop on Basic Ontological Issues in Knowledge Sharing.

Guarino, N., Giarretta, P. (1995). Ontologies and knowledge bases: towards a terminological clarification. In: Mars, N. (ed.): Towards Very Large Knowledge Bases: Knowledge Building and Knowledge Sharing. IOS Press, Amsterdam, pp. 25–32.

Guarino, N. (1997a). Understanding, building, and using ontologies: A commentary to "Using Explicit Ontologies in KBS Development", by van Heijst, Schreiber, and Wielinga. *Int. J. Hum.- Comput. St.* 46 (2/3), 293–310.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [G-H]**

Guarino, N. (1997b). Semantic matching: formal ontological distinctions for information organization, extraction, and integration. In: Paziienza, M.T. (ed.): Information

Extraction: A Multidisciplinary Approach to an Emerging Information Technology. Springer, Berlin, pp. 139–170.

Guarino, N. (1998). Formal ontology and information systems. In: Guarino, N. (ed.): Formal Ontology in Information Systems. IOS Press, Amsterdam, pp. 3–15.

Gunnar A. Grimnes, Leo Sauermann, and Ansgar Bernardi. The Personal Knowledge Workbench of the NEPOMUK Semantic Desktop. In Proceedings of the 6th European Semantic Web Conference on The Semantic Web: Research and Applications, pages 836–840, 2009.

H. Story. Semantic Object (Metadata) Mapper [online]. Available at <http://sommer.dev.java.net/sommer>, cit. 6/10/2010.

Hendler, J. (2007). Where are all the intelligent agents? *IEEE Intell. Syst.* 22(3), 2–3.

Hodges, W. 1983: Elementary predicate logic. In: Gabbay, D. M., Guentner, F. (eds.): *Handbook of Philosophical Logic – Vol. I: Elements of Classical Logic*. D. Reidel, Dordrecht, pp. 1–131.

Hoekstra, R., Breuker, J., Di Bello, M., Boer, A. (2007). The LKIF core ontology of basic legal concepts. In: Casanovas, P., Biasiotti, M.A., Francesconi, E., Sagri, M.T. (eds.): *Proceedings of the 2nd Workshop on Legal Ontologies and Artificial Intelligence Techniques*. CEUR Workshop Proceedings, pp. 43-63.

Hofweber, T. (2005). Logic and ontology. In: Zalta, E.N. (ed.): *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Winter 2005 Edition). Online available at <http://plato.stanford.edu/archives/win2005/entries/logic-ontology/>. Accessed January 2007.

Holger Knublauch, Phil Tetlow, Evan Wallace, and Daniel Oberle. A Semantic Web Primer for Object-Oriented Software Developers [online]. W3C Note, W3C, 2006. Available at <http://www.w3.org/TR/2006/NOTE-sw-oosd-primer-20060309>.

Huang HJ, Ramaswamy S, Tschirner U, Ramarao B. A review of separation technologies in current and future biorefineries. *Separation and purification technology*. 2008;62(1):1-21.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [H-L]**

Huang, H.J., Lin, W., Ramaswamy, S., and Tschirner, U. (2009) “ Process Modeling of Comprehensive Integrated Forest Biorefinery - An integrated approach”, Applied Biochemical Biotechnology, 154:205-216.

Ian Horrocks. OWL: A Description Logic Based Ontology Language. In Principles and Practice of Constraint Programming (CP 2005), pages 5–8, 2005.

IEA. Bio-based Chemicals. Value Added Products from Biorefineries. IEA Bioenergy. 2012;Task 42. Biorefinery.

Jarrar, M., Meersman, R. (2002). Scalability and knowledge reusability in ontology modeling. In: Proceedings of the International conference on Infrastructure for e-Business, e-Education, e- Science, and e-Medicine SSGRR2002.

Jeremy J. Carroll and Graham Klyne. Resource Description Framework (RDF): Concepts and Abstract Syntax [online]. W3C Recommendation, W3C, 2004. Available at <http://www.w3.org/TR/2004/REC-rdf-concepts-20040210>.

Jeremy J. Carroll, Ian Dickinson, Chris Dollin, Dave Reynolds, Andy Seaborne, and Kevin Wilkinson. Jena: implementing the semantic web recommendations. In Proceedings of WWW (Alternate Track Papers & Posters), pages 74–83, 2004.

Kamm B, Kamm M, Gruber PR, Kromus S. Biorefinery Systems—An Overview. Biorefineries-Industrial Processes and Products: Status Quo and Future Directions. 2008:1-40.

Lloyd, J.W. (1987). Foundations of Logic Programming, 2nd edition. Springer, Berlin.

Lassila, O., McGuinness, D. (2001). The Role of Frame-Based Representation on the Semantic Web. Technical Report (KSL-01-02), Knowledge Systems Laboratory, Stanford University. Online available at [http://www-ksl.stanford.edu/KSL\\_Abstracts/KSL-01-02.html](http://www-ksl.stanford.edu/KSL_Abstracts/KSL-01-02.html). Accessed October 2007.

Lenat, D., Guha, R.V. (1990). Building Large Knowledge-Based Systems: Representation and Inference in the Cyc Project. Addison Wesley.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [L-M]**

Liu S, Abrahamson LP, Scott GM. Biorefinery: Ensuring biomass as a sustainable renewable source of chemicals, materials, and energy. *Biomass and Bioenergy*. 2012;39:1-4.

Lv an Tang, Hongyan Li, Baojun Qiu, Meimei Li, Jianjun Wang, Lei Wang, Bin Zhou, Dongqing Yang, and Shiwei Tang. WISE: A Prototype for Ontology Driven Development of Web Information Systems. In *APWeb*, pages 1163–1167, 2006.

Marquardt, W., Morbach, J., Wiesner, A., Yang, A. (2009). *OntoCAPE – A (Re)Usable Ontology for Chemical Process Engineering*. Springer, Berlin, *Computers and Chemical Engineering* 33, pp. 1546–1556.

Matthew Horridge and Sean Bechhofer. The OWL API: A Java API for OWL ontologies. *Semantic Web – Interoperability, Usability, Applicability*, 2(1):11–21, 2011.

Mauri Leppanen. A Perspective Ontology and IS Perspectives. In *Proceeding of the 2008 conference on Information Modelling and Knowledge Bases XIX*, pages 257–275, Amsterdam, The Netherlands, 2008. IOS Press.

Max Volkel. *RDFReactor – From Ontologies to Programatic Data Access*. In *Proceedings of Jena User Conference*. HP Bristol, 2006.

McGuinness, D. L. (2002). Ontologies come of age. In: Fensel, D., Hendler, J., Lieberman, H., Wahlster, W. (eds.): *Spinning the Semantic Web: Bringing the World Wide Web to Its Full Potential*. MIT Press, pp. 171–194.

Minsky, M. (1975). A framework for representing knowledge. In: Winston, P.H. (ed.): *The Psychology of Computer Vision*. McGraw-Hill, New York.

Mizoguchi, R., Vanwelkenhuysen, J., Ikeda, M. (1995). Task ontologies for reuse of problem solving knowledge. In: Mars, N. (ed.): *Towards Very Large Knowledge Bases: Knowledge Building and Knowledge Sharing*. IOS Press, Amsterdam, pp. 46–57.

Moein Mehroolhassani and Atilla Elci. OLS: An Ontology Based Information System. In *Proceedings of International Conference on Complex, Intelligent and Software Intensive Systems (CISIS 2008)*, pages 892–898, 2008.

Moncada J, El-Halwagi MM, Cardona CA. Techno-economic analysis for a sugarcane biorefinery: Colombian case. *Bioresource technology*. 2012;In Press.

Morbach, J., Yang, A., Marquardt, W. (2007): *OntoCAPE – a large-scale ontology for chemical process engineering*. *Eng. Appl. Artif. Intel.* 20 (2), 147–161.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [M-R]**

- Mozilla Firefox Homepage [online]. Available at <http://www.mozilla.org/firefox>.
- Naik, S.N., Goud, V.V., Rout, P.K. and Dalai, A.K. (2010) “Production of first and second generation biofuels: A comprehensive review”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 14:578-597.
- Neches, R. Fikes, R., Finin, T., Gruber, T., Patil, R., Senator, T. Swartout, W.R. (1991). Enabling technology for knowledge sharing. *AI Mag.* 12 (3), 36–56.
- NeON Project Homepage , 2006, [online]. Available at <http://www.neon-project.org/>.
- Niles, Pease (2001). Towards a standard upper ontology. In: Guarino, N., Welty, C., Smith, B. (eds.): *Proceedings of the 2nd International Conference on Formal Ontology in Information Systems (FOIS-2001)*. ACM, pp. 2–9.
- Pâslaru-Bontas, E. (2007). *Contextual Approach to Ontology Reuse: Methodology, Methods and Tools for the Semantic Web*. PhD Thesis, FU Berlin.
- Patrick Hayes. *RDF Semantics* [online]. W3C Recommendation, W3C, 2004. Available at <http://www.w3.org/TR/rdf-nt>.
- Peter F. Patel-Schneider, Patrick Hayes, and Ian Horrocks. *OWL Web Ontology Language Semantics and Abstract Syntax* [online]. W3C Recommendation, W3C, 2004. Available at <http://www.w3.org/TR/2004/REC-owl-semantics-20040210>.
- Peter Mika and James Leigh. *Elmo User Guide*, 2006 [online]. Available at <http://www.openrdf.org/elmo.jsp>.
- Peter F. Patel-Schneider, and Bijan Parsia. *OWL 2 Web Ontology Language Structural Specification and Functional-Style Syntax* [online]. W3C Recommendation, W3C, 2009. Available at <http://www.w3.org/TR/2009/REC-owl2-syntax-20091027>.
- Pham V, El-Halwagi M. Process synthesis and optimization of biorefinery configurations. *AIChE Journal*. 2011;58(4):1212-21.
- Posada JA, Rincón LE, Cardona CA. Design and analysis of biorefineries based on raw glycerol: Addressing the glycerol problem. *Bioresource technology*. 2012;111:282–93.
- Ramanathan V. Guha and Dan Brickley. *RDF Vocabulary Description Language 1.0: RDF Schema* [online]. W3C Recommendation, W3C, 2004. Available at <http://www.w3.org/TR/2004/REC-rdf-schema-20040210>.



**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [R-S]**

Rector, A., Solomon, W.D., Nowlan, W.A., Rush, T.W. (1995). A terminology server for medical language and medical information systems. *Methods Inf. Med.* 34 (1/2), 147–157.

Rosemary Shrestha, Hector Sanchez, Claudio Ayala, Peter Wenzl, and Arnaud Elizabeth. Ontology-driven International Maize Information System (IMIS) for Phenotypic and Genotypic Data Exchange, 2010. Available at <http://precedings.nature.com/documents/5029>, cit. 15/10/2011.

RDF2Java Homepage [online]. Available at <http://rdf2java.opendfki.de>, cit. 21/8/2011.

RDFAPI Homepage [online]. Available at <http://www4.wiwiss.fu-berlin.de/bizer/rdfapi>.

Schneider, L. (2003). How to build a foundational ontology: the object-centered high-level reference ontology OCHRE. In: Günter, A., Kruse, R., Neumann, B. (eds.): *KI 2003: Advances in Artificial Intelligence*. Springer, Berlin, pp. 120–134.

Sebastian Schaffert. IkeWiki: A Semantic Wiki for Collaborative Knowledge Management. In *Proceedings of the 15th IEEE International Workshops on Enabling Technologies: Infrastructure for Collaborative Enterprises*, pages 388–396, Washington, DC, USA, 2006. IEEE Computer Society.

Semantic Web Conference (ISWC'07/ASWC'07), pages 508–522, Berlin, Heidelberg, 2007. Springer-Verlag.

Smith, M.K., Welty, C., McGuinness, D.L., eds. (2004). *OWL Web Ontology Languages Guide*. W3C Recommendation, 10 February 2004. Online available at <http://www.w3.org/TR/owl-guide/>. Accessed 29 Oct 2007.

Smith, B. (2006). Against idiosyncrasy in ontology development. In: Bennett, B., Fellbaum, C. (eds.): *Formal Ontology in Information Systems*. IOS Press, pp. 15–26.

Sowa, J.F. (1995). Top-level ontological categories. *Int. J. Hum.-Comput. St.* 43 (5/6), 669–685.

Stanford Center for Biomedical Informatics Research, Protégé Homepage [online]. Available at <http://protege.stanford.edu>.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [S-U]**

Steve Harris and Andy Seaborne. SPARQL 1.1 Query Language [online]. W3C Working Draft, W3C, 2012. Available at <http://www.w3.org/TR/2012/WD-sparql11-query-20120105/>.

Stoeglehner G, Narodoslowsky M. How sustainable are biofuels? Answers and further questions arising from an ecological footprint perspective. *Bioresource technology*. 2009;100(16):3825-30.

Studer, S. , Benjamins, V.R., Fensel, D. (1998). Knowledge engineering principles and methods. *Data Knowl. Eng.* 25 (1/2), 161–197.

SurfRDF Homepage [online]. Available at <http://code.google.com/p/surfrdf/>.

Tay, D.H.S., Ng, D.K.S., Sammons, N.E., and Eden, M.R. (2011) “Fuzzy Optimization Approach for the Synthesis of a Sustainable Integrated Biorefinery”, *Industrial Engineering Chemical Resources*, 50: 1652-1655.

Tim Berners-Lee, James Hendler, Ora Lassila, "The Semantic Web," *Scientific American Magazine*, 284(5):34–43, May 17, 2001.

Tim Finin, Yun Peng, R. Scott, Cost Joel, Sachs Anupam Joshi, Pavan Reddivari, Rong Pan, Vishal Doshi, and Li Ding. Swoogle: A Search and Metadata Engine for the Semantic Web. In *Proceedings of the Thirteenth ACM Conference on Information and Knowledge Management*, pages 652–659. ACM Press, 2004.

Thanh Tran, Peter Haase, Holger Lewen, Oscar Munoz-Garcia, Asuncion Gomez-Perez, and Rudi Studer. Lifecycle-support in architectures for ontology-based information systems. In *The Semantic Web, 6th International Semantic Web Conference, 2nd Asian TopBraid Composer Homepage [online]*, 2001-2014, Available at <http://www.topquadrant.com/tools/ide-topbraid-composer-maestro-edition/>.

Turing, A.M. (1950). Computing machinery and intelligence. *Mind*, 59, 433-460.

URI Planning Interest Group, W3C/IETF (21 September 2001). "URIs, URLs, and URNs: Clarifications and Recommendations 1.0", Online available at <http://www.w3.org/TR/uri-clarification/>.

Uschold, M., Grüninger, M. (1996). *Ontologies: principles, methods and applications*. *Knowl. Eng. Rev.* 11 (2), 93–136.

**BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ [V-Y]**

Valente, A., Breuker, J. (1996). Towards principled core ontologies. In: Gaines, B.R., Mussen, M. (eds.): Proceedings of the 10th Banff Knowledge Acquisition for Knowledge-Based Systems Workshop. SDRG Publications.

Van Heijst, G., Schreiber, A.T., Wielinga, B.J. (1997a). Using explicit ontologies in KBS development. *Int. J. Hum.-Comput. St.* 46 (2/3), 183–292.

Van Heijst, G., Schreiber, A.T., Wielinga, B.J. (1997b). Roles are not classes: a reply to Nicola Guarino. *Int. J. Hum.-Comput. St.* 46 (2/3), 311–318.

W3C (2000). The RDFS representation ontology. Web resource. Online available at <http://www.w3.org/2000/01/rdf-schema>. Accessed June 2008.

W3C (2002). The OWL representation ontology. Online available at <http://www.w3.org/2002/07/owl>. Accessed October 2007.

W3C (2006). Extensible Markup Language (XML). Online available at <http://www.w3.org/XML/>. Accessed December 2007.

Wepry, T., Peterson, G., Aden, A., Bozell, J., Holladay, J., White, J., and Mannheim, A. (2004) “Top Value Added Chemical from Biomass, Vol. I - Results of Screening for Potential Candidates from Sugars and Synthesis Gas”, Pacific Northwest National Laboratory (PNNL); National Renewable Energy Laboratory (NREL), [Online] Available at: <http://www1.eere.energy.gov/biomass/pdfs/35523.pdf> (accessed April 16, 2012).

Yun, C., Kim, Y., Park, J., and Park, S. (2009) “Optimal procurement and operational planning for risk management of an integrated biorefinery process”, *Chemical Engineering Research and Design*, 87: 1184-1190.

