



HAL
open science

OntoPFAS : Ontologie des PFAS et de leur exposition

Davide Di Pierro, Lylia Abrouk, Alexis Guyot, Danai Symeonidou, Benjamin Lysaniuk, Pierre Labadie

► To cite this version:

Davide Di Pierro, Lylia Abrouk, Alexis Guyot, Danai Symeonidou, Benjamin Lysaniuk, et al.. OntoPFAS : Ontologie des PFAS et de leur exposition. PFIA 2025 - 36es Journées francophones d'Ingénierie des Connaissances, PFIA, Jul 2025, Dijon, France. 7 p. <hal-05399456>

HAL Id: hal-05399456

<https://hal.science/hal-05399456v1>

Submitted on 4 Dec 2025

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire HAL, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons CC BY-NC-ND 4.0 - Attribution - Non-commercial use - No Derivative Works - International License

OntoPFAS : Ontologie des PFAS et de leur exposition

Davide Di Pierro¹, Lylia Abrouk^{1,2}, Alexis Guyot³,
Danai Symeonidou¹, Pierre Labadie⁴, Benjamin Lysaniuk⁵

¹ MISTEA, INRAE & Institut Agro, France

² LIB, Université Bourgogne Europe, France

³ LIRMM, Université de Montpellier, CNRS, France

⁴ CNRS UMR EPOC, Talence

⁵ CNRS UMR PRODIG, Aubervilliers

davide.di-pierro@umontpellier.fr

Résumé

La construction d'ontologies est une des premières tâches dans le domaine de la représentation des connaissances. Elle reste très pertinente aujourd'hui, grâce à l'expressivité des langages formels, qui permettent encore d'explorer et de découvrir des connaissances. Pendant des décennies, la communauté a développé des méthodologies pour la construction manuelle d'ontologies, et plusieurs classifications de celles-ci ont été proposées. Dans cet article, nous présentons une méthodologie de construction d'ontologie basée sur des méthodes existantes, et nous l'appliquons à la représentation du domaine des PFAS (Per- et poly- fluoroalkyle substances) et de leur exposition. Les PFAS sont des substances dont la structure chimique particulière les rend très résistantes et efficaces dans de nombreuses applications industrielles. Ils suscitent un intérêt croissant en raison de leur impact négatif sur la santé et l'environnement. Ce travail s'inscrit dans le cadre du projet interdisciplinaire DAE (Détection d'Anomalies Environnementales).

Mots-clés

Ontologie, représentation des connaissances, PFAS, environnement.

Abstract

Ontology construction is one of the earliest tasks in the field of knowledge representation. It remains highly relevant today, thanks to the expressiveness of formal languages, which still allow for the exploration and discovery of knowledge. For decades, the community has developed methodologies for the manual construction of ontologies, and several classifications of these have been proposed. In this article, we present a methodology for constructing ontologies based on existing methods, and we apply it to represent the domain of PFAS and their exposition. PFAS are substances with a unique chemical structure that makes them highly resistant and effective in many industrial applications. They have been drawing increasing attention due to their negative impact on health and the environment. This work is part of the interdisciplinary DAE (Environmental

Anomaly Detection) project.

Keywords

Ontology, knowledge representation, PFAS, environment.

1 Introduction

La représentation des connaissances et l'ingénierie des ontologies sont parmi les premières thématiques de recherche en intelligence artificielle, et elles continuent d'attirer une attention, tant sur le plan théorique que pratique. Une ontologie constitue une représentation formelle des éléments qui composent un domaine spécifique [20]. Grâce à l'expressivité des langages formels utilisés pour décrire ces ontologies, il est possible d'introduire un raisonnement logique permettant d'inférer de nouvelles connaissances ou de détecter des incohérences dans les informations existantes. Bien que les ontologies aient trouvé des applications dans divers domaines, aucune conceptualisation des connaissances relatives aux PFAS n'a encore été élaborée.

Les substances per- et polyfluoroalkyles (PFAS) sont des composés organiques fluorés possédant des propriétés physiques, chimiques et biologiques très diverses [2]. D'un point de vue socio-économique, les PFAS répondent à de nombreux besoins et sont utilisés dans une variété de contextes industriels. Cependant, leur persistance dans l'environnement et leur toxicité ont un impact négatif sur la santé humaine et l'écosystème. Plusieurs études récentes ont exploré ces effets, notamment en analysant les concentrations de PFAS et leur devenir dans les masses d'eau, l'une des principales voies d'exposition humaine [12, 19].

Face à l'urgence d'analyser et de répondre à diverses questions concernant les PFAS, il est crucial de développer une classification formelle de ces substances et de leurs interactions avec l'environnement. Bien que certaines classifications informelles existent, aucune n'a été conçue pour spécifier la présence des PFAS dans l'environnement, un facteur essentiel pour comprendre le phénomène et réguler leur utilisation. La classification que nous proposons vise deux objectifs principaux : d'une part, offrir une ressource ouverte qui puisse être utilisée et enrichie par la communauté

scientifique; d'autre part, permettre l'intégration de cette classification avec des données ou ressources existantes afin de découvrir de nouvelles connaissances sur les PFAS et le phénomène dans son ensemble, en exploitant les mécanismes de raisonnement pour identifier des incohérences ou des comportements atypiques.

Dans le cadre du projet *Forever Pollution* [5], le journal *Le Monde*, a publié une carte de la pollution éternelle¹, recensant les coordonnées géographiques des sites pollués ainsi que des informations détaillées sur les échantillons de PFAS prélevés. Nous exploiterons les données disponibles afin d'enrichir et peupler notre ontologie. En janvier 2024, le CNRS a lancé le projet PDH², dont l'objectif est d'enrichir ces données, d'en assurer l'actualisation continue et de développer des solutions durables. Dans ce contexte, notre projet DAE (*Détection d'anomalies environnementales*), s'appuie sur ces données comme base et mobilise des compétences interdisciplinaires en sciences des données, chimie environnementale et géographie.

La suite de cet article est organisée de la manière suivante : dans la section 2, nous présentons l'état de l'art sur les méthodes de construction d'ontologies et les ontologies existantes liées aux PFAS. La section 3 décrit notre approche pour modéliser les PFAS à travers une ontologie, tout en répondant aux questions de compétence et en évaluant notre travail selon les principes FAIR. Enfin, la section 4 conclut l'article et explore les extensions possibles de ce travail.

2 Travaux antérieurs

Méthodes pour la construction d'ontologies : En raison de la diversité des domaines et des projets nécessitant leur élaboration, une riche littérature a émergé sur les différentes méthodes et approches. Ces méthodes peuvent être classifiées selon plusieurs critères, tels que la généralité de leur stratégie, l'approche adoptée (ascendante ou descendante), et leur niveau de formalisation [6, 18]. Parmi les approches les plus établies et reconnues figurent *Methontology* [10] et *Ontology Development 101* [13]. La première, qui est l'une des approches les plus anciennes, souffre d'un inconvénient majeur : une phase d'intégration qui intervient trop tardivement, après la formalisation, et l'absence d'une étape itérative pour l'amélioration. En revanche, la seconde anticipe mieux l'intégration avec d'autres ressources et propose une séquence de documents préparés avant la formalisation, en retardant autant que possible l'utilisation du langage formel.

Certaines approches mettent l'accent sur la séparation des rôles et des responsabilités dans la construction de l'ontologie. Par exemple, l'approche (KA)² [1] divise le processus en deux groupes distincts : le groupe de représentation des connaissances et le groupe de contrôle. Bien que cette approche soit généralement applicable, elle est particulièrement recommandée dans les domaines techniques (ex : médical) en raison de sa rigueur et de sa spécialisation.

1. https://www.lemonde.fr/en/les-decodeurs/article/2023/02/23/forever-pollution-explore-the-map-of-europe-s-pfas-contamination_6016905_8.html

2. <https://pdh.cnrs.fr/en/>

L'une des approches distribuées les plus connues est DILIGENT [15], proposée comme une méthodologie qui commence par le travail conjoint d'experts en ontologie et en domaine, et qui conduit ensuite à des raffinements successifs fournis par les utilisateurs qui commencent à travailler avec l'ontologie. Un groupe CORE est ensuite chargé de fusionner les raffinements locaux avec la conceptualisation partagée, si nécessaire. Dans notre cas, la différence entre les utilisateurs et le groupe CORE ne serait pas si évidente, et l'introduction de nouveaux domaines rend les étapes itératives nécessaires.

Les stratégies ultérieures ont tenté d'atténuer les inconvénients d'une approche ontologique en cascade en utilisant les principes agiles. Citons par exemple SAMOD [14] (ou son extension ACIMOV [11]) pour gérer correctement les changements d'élicitations et la coordination entre différents groupes en développant des *modele*t de scénarios. UPONLite [7] suit les étapes traditionnelles identifiées par la méthodologie de la chute d'eau, en introduisant des itérations dans toutes les phases après la définition du glossaire. L'interaction entre les utilisateurs et les experts est facilitée par des interfaces visuelles. Dans le contexte des méthodes agiles, la communication entre les personnes impliquées doit être accélérée. C'est pourquoi les approches actuelles comme AgiSCOnt [21] visent principalement à faire parler le même langage aux non-experts et aux experts par le biais d'interfaces visuelles et de cas d'utilisation. Ces derniers guident le développement de nouvelles versions.

Avec l'essor des données liées, il devient nécessaire pour les ontologies de s'adapter à cette nouvelle source d'informations. La méthodologie *Linked Open Terms* (LOT) [17] se distingue par sa généralité, sa formalité logicielle et son caractère itératif. Par rapport à de nombreuses autres méthodologies, elle est plus exhaustive et fournit des lignes directrices pour structurer efficacement les connaissances. De plus, elle peut être adoptée à différents niveaux de formalité et comprend une partie d'intégration pour faciliter la réutilisation.

Ontologies existantes : La première classification des PFAS a été proposée par Buck et al. en 2011 [2], et se concentre principalement sur la structure chimique des substances. La classification la plus récente et la plus complète des PFAS a également été proposée par Buck et al. en 2021 [3]. Bien qu'elle soit encore largement axée sur l'aspect chimique, elle inclut désormais des informations supplémentaires sur la présence des PFAS et leurs différentes sous-catégories. Bien qu'aucune ontologie ne soit spécifiquement dédiée aux PFAS et à leur impact environnemental, plusieurs ontologies et vocabulaires connexes existent. Les connaissances qu'ils encapsulent peuvent être réutilisées et adaptées à notre contexte.

Dans le domaine de la chimie, l'ontologie ChEBI [8] est une référence, couvrant une large gamme de substances chimiques et bénéficiant d'un consensus général au sein de la communauté scientifique. D'autres ressources pertinentes

pour nos objectifs incluent l'Exposure Ontology (ExO)³ et la terminologie Tox21⁴. L'ontologie ExO se concentre sur l'exposition humaine à des substances environnementales affectant la santé. Elle couvre des aspects tels que les maladies, les réactions physiologiques, l'anatomie humaine et les principaux phénomènes d'exposition, tout en prenant en compte les dimensions temporelles et spatiales. De son côté, Tox21 aborde la toxicité, les substances toxiques et leurs effets sur la santé.

L'ontologie ENVO⁵ constitue une référence pour la modélisation du domaine environnemental. Elle vise à fournir des vocabulaires permettant de caractériser aussi bien les environnements naturels que ceux modifiés par l'activité humaine, ainsi que les processus biologiques et leurs interactions. Par ailleurs, les concepts de l'ontologie SOSA⁶ peuvent être réutilisés pour la représentation des mesures. Nous nous appuyons sur ces ressources pour élaborer une première version de notre ontologie dédiée aux PFAS et à leur impact sur l'environnement.

3 Approche

Dans cette section, nous présentons notre méthodologie pour la modélisation de l'ontologie *OntoPFAS* développé dans le cadre de notre projet, qui vise à modéliser et structurer les relations entre les PFAS et leur exposition. Nous avons basé notre approche sur la méthodologie *Linked Open Terms*, en l'adaptant afin d'avoir une approche itérative avec plusieurs groupes d'experts.

L'objectif est de proposer une méthode applicable dans divers contextes dans lesquels de nombreux groupes d'experts collaborent. Aussi, toutes les exigences ne sont pas explicites dès le départ, en raison du manque de travaux ou de données existantes ; une évaluation experte est requise pour appréhender la complexité et la nature scientifique du domaine.

Dans un premier temps, nous introduisons les questions de compétence auxquelles l'ontologie devra répondre. Les premières questions identifiées avec les experts (un géographe et un chimiste) sont les suivantes :

1. Quels sont les PFAS et comment sont-ils classés en fonction de leur structure chimique ?
2. Quelles sont les principales sources industrielles et naturelles des PFAS ?
3. Quels processus environnementaux influencent la dispersion des PFAS dans les différents compartiments (air, eau, sol, biote) ?
4. Quelles sont les méthodes analytiques permettant de détecter et quantifier les PFAS ?
5. Quels sont les sites où les PFAS sont les plus présents ?
6. Comment la présence de PFAS sur un site évolue-t-elle dans le temps ?

3. <https://bioportal.bioontology.org/ontologies/EXO>

4. <https://tox21.gov/overview/>

5. <https://bioportal.bioontology.org/ontologies/ENVO>

6. <https://www.w3.org/TR/vocab-ssn/>

7. Quels sont les PFAS les plus mesurés ?

La figure 1 illustre notre méthodologie. Les phases entourées d'une bordure noire (Fusion de glossaires et Validation des modifications) représentent les deux éléments ajoutés dans la méthodologie LOT.

Dans la *Fusion de glossaire* phase, l'objectif est de consolider les concepts communs à plusieurs domaines et d'en fournir une définition cohérente et complète pour l'ensemble des disciplines concernées. Cette étape influence également la réutilisation des ontologies existantes, en guidant le choix vers les sources les plus pertinentes et les plus complètes. Quant à la *Validation des modifications*, elle nécessite une évaluation rigoureuse des changements par des experts dans chaque domaine. Ce processus est itératif, car tout changement peut déclencher une cascade d'ajustements successifs. Cette phase peut également se produire lorsqu'un domaine entièrement nouveau doit être introduit, ce qui entraîne la nécessité d'ajouter de nouvelles exigences à celles qui existent déjà dans les autres domaines. Les phases ajoutées sont menées avec l'aide d'experts du domaine qui veillent à ce que les exigences (resp. les changements) soient conformes à leur domaine.

3.1 Construction d'ontologie

Dans cette section, nous proposons notre première version de l'ontologie *OntoPFAS*. Le préfixe de notre ontologie est « **ontopfas** ». Nous présentons ici la liste des principaux termes qui représentent les différents aspects de cette première conceptualisation : **PFAS** suit la définition de Buck, définie du point de vue chimique plutôt que de son impact sur la santé et l'environnement. L'ontologie ChEBI contient le concept équivalent⁷.

Étant donné l'existence du concept PFAS dans l'ontologie, nous le réutilisons et commençons notre conceptualisation des sous-classes de PFAS à partir de ce concept. Nous n'énumérons ici que certaines des sous-classes telles que **Perfluoroalkyl**, **Polyfluoroalkyl**, **Long chain**, **Short chain**. Nous ne fournissons pas de détails chimiques, mais ces classes donnent des indications sur la toxicité et la résistance des composés PFAS. **Functional group** représente une classe pertinente, indiquant le groupe fonctionnel du PFAS. Il s'agit du composé chimique responsable de la toxicité. Les PFAS contenant du carbone, le concept **Carbon** doit être représenté. Plus précisément, ses instances correspondent au nombre d'atomes de carbone présents dans le composé, comme C_6 ou C_8 . Les PFAS à chaîne longue et courte peuvent être déduits du nombre d'atomes de carbone. **Contamination location** indique le point géographique de la présence d'un PFAS. Un concept essentiel est **Observation**, qui recueille des informations sur la mesure d'un PFAS à un endroit donné. La mesure conserve également la trace de la source (ensemble de données) à laquelle cette mesure appartient (**Dataset**). L'origine peut être exprimée à l'aide des propriétés du Dublin Core. Ces propriétés sont essentielles, notamment pour indiquer la source d'un jeu de données concernant une mesure de PFAS dans

7. http://purl.obolibrary.org/obo/CHEBI_172397

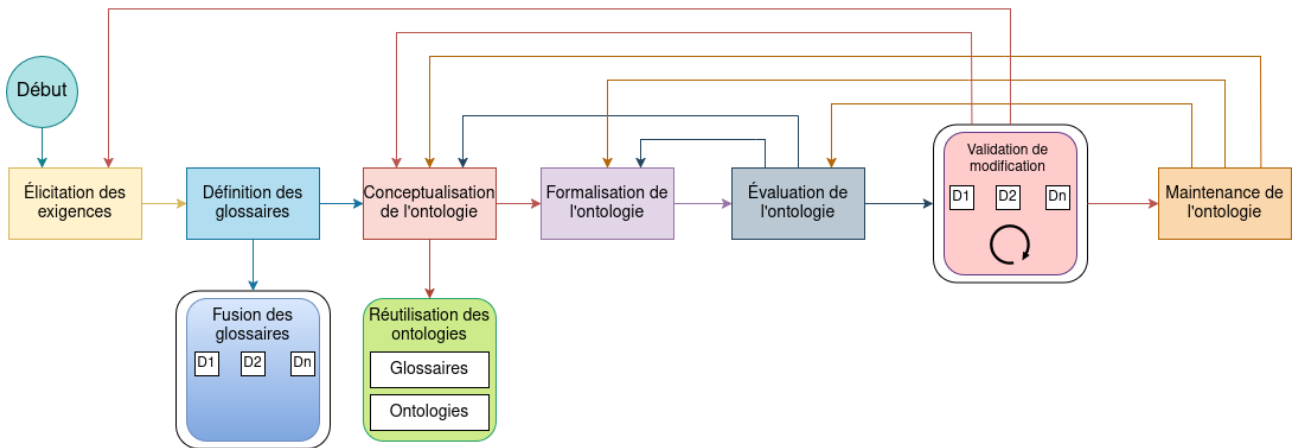


FIGURE 1 – Notre méthodologie à partir de LOT

l'environnement. La mesure est également associée à un **Occupation**, qui indique les caractéristiques géographiques du lieu où la mesure a été effectuée. Les instances de cette classe sont associées à un **Environment** (eau, sol, etc.). Les PFAS sont à la fois utilisés et générés par diverses activités, représentées par **Activity**, qui se spécialisent selon les secteurs d'application, qu'ils soient privés ou publics. L'exposition est ensuite modélisée par **Exposure**, qui intègre des informations sur un PFAS affectant certaines personnes (**Human individual**). Parmi elles, les individus vulnérables (**Vulnerable individual**) peuvent être distingués selon leur catégorie, comme les **Pregnant Woman** ou les **Newborn**. Le concept d'exposition peut utiliser de nombreux éléments de l'Exposure Ontology, notamment **Exposure outcome** et **Exposure stimulus**. Les deux premiers niveaux de la hiérarchie des classes de l'ontologie sont illustrés dans la figure 2, où, par souci de clarté, nous n'affichons pas notre préfixe. Compte tenu de ces concepts, nous pouvons énumérer les plus importantes propriétés de l'ontologie. Un PFAS **has_chemical_structure** composé d'atomes de carbone tandis que **Observation** représente la mesure spécifique d'un PFAS (**measured_pfas**) dans un région géographique (**in_occupation**) et dans un lieu (**is_measured_in**). Une activité **uses** ou **produces** des produits, et un produit **contains** PFAS. Enfin, une instance d'exposition **concerns** PFAS et **affects** des personnes. À ce stade, nous pouvons déjà définir certains axiomes qui nous aideront à classer les instances :

$$\begin{aligned} \text{Perfluoroalkyl} \sqcap \text{Polyfluoroalkyl} &\sqsubseteq \perp. \\ \text{Long chain} \sqcap \text{Short chain} &\sqsubseteq \perp. \\ \text{Non polymer} \sqcap \text{Polymer} &\sqsubseteq \perp. \\ \text{Short chain} &\equiv \exists \text{has_chemical_structure}. \\ &(\text{number_of_atoms} \leq 7). \\ \text{Long chain} &\equiv \exists \text{has_chemical_structure}. \\ &(\text{number_of_atoms} > 7). \end{aligned}$$

3.2 Evaluation de l'ontologie

L'évaluation d'une ontologie est généralement basée sur le domaine, les utilisateurs et de la spécificité des questions de compétence auxquelles l'ontologie doit répondre. Les

requêtes SPARQL suivantes permettent de répondre aux questions de compétence. Par souci de concision et de limitation d'espace, les préfixes ne sont pas affichés.

- (i)

```
SELECT ?C ?x ?y WHERE {
  ?C rdfs:subClassOf :PFAS. ?x a ?C.
  ?x :has_chemical_structure ?y.}
```
- (ii)

```
SELECT DISTINCT ?a WHERE {
  ?pfas rdf:type :PFAS.
  ?p rdf:type :Product.
  ?p :contains ?pfas.
  ?a :produces ?p.}
```
- (iii)

```
SELECT DISTINCT ?e WHERE {
  ?m rdf:type :Measurement.
  ?o rdf:type :Occupation.
  ?m :in_occupation ?o.
  ?o :in_environment ?e.}
```
- (iv)

```
SELECT ?d ?m WHERE {
  ?d :has_method ?m.}
```
- (v)

```
SELECT ?l WHERE {
  ?m :is_measured_in ?l.
  ?m a :Observation.
  ?m :hasSimpleResult ?v.
  ?m :resultTime ?t.
  ?m :measured_pfas ?p.
  FILTER NOT EXISTS {
    ?hatm a :Observation.
    ?hatm :resultTime ?hatt.
    ?hatm :is_measured_in ?l.
    ?hatm :measured_pfas ?p.
    FILTER (?hatt > ?t). }
  FILTER ({ SUM(?v) >= k }) }
```
- (vi)

```
SELECT ?l ?t WHERE {
  ?m a :Observation.
  ?m :resultTime ?t.
  ?m :is_measured_in ?l.}
```
- (vii)

```
SELECT ?class (COUNT(?c) WHERE {
  ?pfas a :PFAS. ?m :measures ?pfas.
  FILTER (?class = :Short chain ||
```

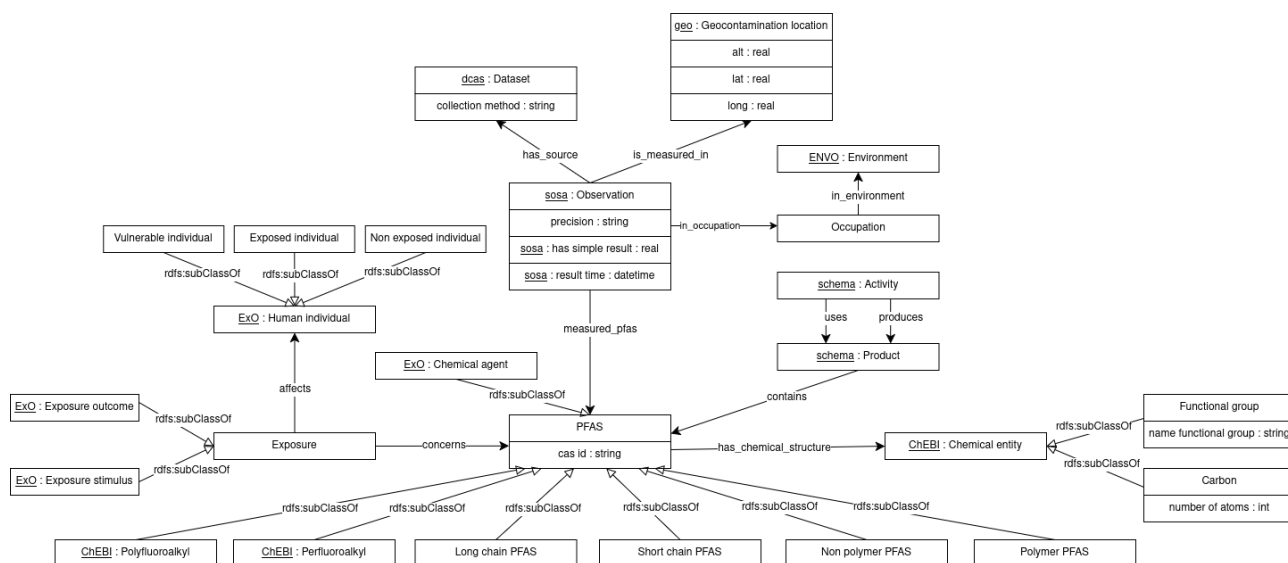


FIGURE 2 – Diagramme pour l'ontologie OntoPFAS

```
?class = :Long chain) }
GROUP BY ?class ORDER BY DESC(?c)
```

La requête (i) extrait toutes les sous-classes de PFAS et, pour chaque instance de la sous-classe, nous récupérons des informations sur leur structure chimique. La requête (ii) extrait toutes les activités générant un produit contenant des PFAS. La requête (iii) identifie tous les types d'environnements dans lesquels les PFAS ont été détectés. La requête (iv) récupère toutes les méthodes permettant d'obtenir des mesures dans les PFAS. La requête (v) récupère tous les lieux où la concentration globale de PFAS dépasse un certain seuil, en veillant à ne conserver que la dernière mesure effectuée pour un même PFAS dans un même lieu. La requête (vi) récupère toutes les mesures de PFAS dans un lieu spécifique, en prenant en compte l'heure des observations. Enfin, la requête (vii) recense les PFAS les plus fréquemment mesurés en fonction de leur catégorie chimique.

Au-delà des réponses aux **questions de compétence**, nous nous appuyons sur des **principes et lignes directrices** modernes afin de garantir une évaluation conforme aux principes généraux des **Linked Data**⁸ et du **FAIR** (*Findable, Accessible, Interoperable, Reusable*) [4]. En suivant les recommandations de Villalón et al. [16], nous vérifions la conformité aux principes FAIR :

- **Findable** : attribution d'identifiants aux métadonnées, ajout de métadonnées descriptives (étiquette, version et commentaire) et publication dans **GitHub**.
- **Accessible** : réutilisation de métadonnées existantes et publication de l'ontologie sur **GitHub**⁹, garantissant un accès via un protocole sécurisé avec authentification et autorisation.

8. <https://www.w3.org/DesignIssues/LinkedData.html>

9. <https://github.com/davide1797/PFAS.git>

- **Interoperable** : utilisation du langage OWL, standard formel, partagé et accessible, ainsi que la réutilisation de ressources existantes pour plusieurs concepts clés.

- **Reusable** : mise à disposition des données sous licence **GNU General Public License v3.0** et des (méta)données via le glossaire standard Dublin Core.

Notre ontologie satisfait 14 des 17 recommandations FAIRsFAIR [9] et est ainsi considérée comme un vocabulaire 5 étoiles¹⁰.

4 Conclusion

Dans cet article, nous avons développé une première ontologie dédiée à la représentation des PFAS dans l'environnement et à leur exposition aux personnes. Nous avons adapté la méthodologie LOT afin d'assurer une modélisation cohérente et exploitable. Cette première version permet déjà de répondre à des questions de compétence pertinentes dans le domaine. Elle servira de base à l'alignement et à l'intégration de nouvelles sources de données, facilitant ainsi l'interopérabilité avec d'autres ontologies et jeux de données existants. Les perspectives d'évolution de ce travail incluent l'élargissement du périmètre à d'autres domaines, l'enrichissement des données sur les PFAS et l'introduction de règles avancées pour le raisonnement, afin d'améliorer l'analyse et la détection d'anomalies environnementales.

Remerciements

Ce travail bénéficie du soutien conjoint de l'Institut ExposUM et de la Mission pour les Initiatives Transverses et Interdisciplinaires (MITI) du CNRS.

10. https://bvatant.blogspot.com/2012/02/is-you-r-linked-data-vocabulary-5-star_9588.html

Références

- [1] V Richard Benjamins and Dieter Fensel. The ontological engineering initiative (ka) 2. In *Formal Ontology in Information Systems*, pages 287–301. Citeseer, 1998.
- [2] Robert C Buck, James Franklin, Urs Berger, Jason M Conder, Ian T Cousins, Pim De Voogt, Allan Astrup Jensen, Kurunthachalam Kannan, Scott A Mabury, and Stefan PJ van Leeuwen. Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances in the environment : terminology, classification, and origins. *Integrated environmental assessment and management*, 7(4) :513–541, 2011.
- [3] Robert C Buck, Stephen H Korzeniowski, Evan Laganis, and Frank Adamsky. Identification and classification of commercially relevant per-and polyfluoroalkyl substances (pfas). *Integrated environmental assessment and management*, 17(5) :1045–1055, 2021.
- [4] Neil P Chue Hong, Daniel S Katz, Michelle Barker, Anna-Lena Lamprecht, Carlos Martinez, Fotis E Psomopoulos, Jen Harrow, Leyla Jael Castro, Morane Gruenpeter, Paula Andrea Martinez, et al. Fair principles for research software (fair4rs principles). *Zenodo*, 2022.
- [5] Alissa Cordner, Phil Brown, Ian T. Cousins, Martin Scherlinger, Luc Martinon, Gary Dagorn, Raphaëlle Aubert, Leana Hosea, Rachel Salvidge, Catharina Felke, Nadja Tausche, Daniel Drepper, Gianluca Liva, Ana Tudela, Antonio Delgado, Derrick Salvatore, Sarah Pilz, and Stéphane Horel. Pfas contamination in europe : Generating knowledge and mapping known and likely contamination with “expert-reviewed” journalism. *Environmental Science & Technology*, 58(15) :6616–6627, 2024.
- [6] Nikolai Dahlem and Axel Hahn. User-friendly ontology creation methodologies-a survey. *AMCIS 2009 Proceedings*, page 117, 2009.
- [7] Nina De Lille and Ben Roelens. A practical application of upon lite for the development of a semi-informal application ontology. In *15th International Workshop on Value Modelling and Business Ontologies*, pages 63–70. CEUR-WS, 2021.
- [8] Paula de Matos, Adriano Dekker, Marcus Ennis, Janna Hastings, Kenneth Haug, Steve Turner, and Christoph Steinbeck. Chebi : a chemistry ontology and database. *Journal of cheminformatics*, 2 :1–1, 2010.
- [9] Ingrid Dillo. General overview of fair4rs. 2021.
- [10] Mariano Fernández-López, Asuncion Gomez-Perez, and Natalia Juristo. Methontology : from ontological art towards ontological engineering. *Engineering Workshop on Ontological Engineering (AAAI97)*, 03 1997.
- [11] Fatma-Zohra Hannou Hannou, Victor Charpenay, Maxime Lefrançois, Catherine Roussey, Antoine Zimmermann, and Fabien Gandon. La méthodologie acimov pour l’intégration agile et continue des modules ontologiques. In *35èmes Journées franco-phones d’Ingénierie des Connaissances (IC 2024)-Plateforme d’intelligence artificielle (PFIA 2024)*, pages 127–128, 2024.
- [12] Zhibo Lu, Rong Lu, Hongyuan Zheng, Jing Yan, Luning Song, Juan Wang, Haizhen Yang, and Minghong Cai. Risk exposure assessment of per-and polyfluoroalkyl substances (pfass) in drinking water and atmosphere in central eastern china. *Environmental Science and Pollution Research*, 25 :9311–9320, 2018.
- [13] Natalya F Noy, Deborah L McGuinness, et al. Ontology development 101 : A guide to creating your first ontology, 2001.
- [14] Silvio Peroni. Samod : an agile methodology for the development of ontologies. In *Proceedings of the 13th OWL : Experiences and Directions Workshop and 5th OWL reasoner evaluation workshop (OWLED-ORE 2016)*, pages 1–14, 2016.
- [15] Helena Sofia Pinto, Steffen Staab, and Christoph Tempich. Diligent : Towards a fine-grained methodology for distributed, loosely-controlled and evolving engineering of ontologies. In *ECAI*, volume 16, page 393, 2004.
- [16] María Poveda-Villalón, Paola Espinoza-Arias, Daniel Garijo, and Oscar Corcho. Coming to terms with fair ontologies. In *International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management*, pages 255–270. Springer, 2020.
- [17] María Poveda-Villalón, Alba Fernández-Izquierdo, Mariano Fernández-López, and Raúl García-Castro. Lot : An industrial oriented ontology engineering framework. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 111 :104755, 2022.
- [18] Abdul Sattar, Ely Salwana Mat Surin, Mohammad Nazir Ahmad, Mazida Ahmad, and Ahmad Kamil Mahmood. Comparative analysis of methodologies for domain ontology development : A systematic review. *International Journal of Advanced Computer Science and Applications*, 11(5), 2020.
- [19] Thiago G Schwanz, Marta Llorca, Marinella Farré, and Damià Barceló. Perfluoroalkyl substances assessment in drinking waters from brazil, france and spain. *Science of the total environment*, 539 :143–152, 2016.
- [20] Barry Smith. Ontology. In *The furniture of the world*, pages 47–68. Brill, 2012.
- [21] Daniele Spoladore, Elena Pessot, and Alberto Trombetta. A novel agile ontology engineering methodology for supporting organizations in collaborative ontology development. *Computers in Industry*, 151 :103979, 2023.