



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA E MATEMÁTICA APLICADA
DISCIPLINA DE LINGUAGENS FORMAIS E AUTÔMATOS



Análise do uso de RegEx na biblioteca Glycowork

Andriel Vinicius de Medeiros Fernandes,
Gabrielle de Vasconcelos Borja,
Jeremias Pinheiro de Araújo Andrade,
Lucas Vinicius Dantas de Medeiros,
María Paz Marcato,
Ramon Cândido Jales de Barros

Natal-RN
Outubro, 2025

Nome completo do autor

Análise de uso de RegEx na biblioteca Glycowork

Pesquisa elaborada e apresentada para a disciplina DIM0606 - Linguagens Formais e Autômatos, ofertada pelo Departamento de Informática e Matemática Aplicada da Universidade Federal do Rio Grande do Norte e ministrada no semestre 2025.2 pelo Prof. Dr. Valdicleis da Silva Costa, como requisito parcial para a obtenção de nota para a 1ª unidade.

DIMAP – DEPARTAMENTO DE INFORMÁTICA E MATEMÁTICA APLICADA
CCET – CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
UFRN – UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE

Natal-RN

Outubro, 2025

Análise do uso de RegEx na biblioteca Glycowork

Autores: Andriel Vinicius de Medeiros Fernandes,

Gabrielle de Vasconcelos Borja,

Jeremias Pinheiro de Araújo Andrade,

Lucas Vinicius Dantas de Medeiros,

María Paz Marcato,

Ramon Cândido Jales de Barros

Professor: Valdigleis

RESUMO

O resumo deve apresentar de forma concisa os pontos relevantes de um texto, fornecendo uma visão rápida e clara do conteúdo e das conclusões do trabalho. O texto, redigido na forma impessoal do verbo, é constituído de uma sequência de frases concisas e objetivas e não de uma simples enumeração de tópicos, não ultrapassando 500 palavras, seguido, logo abaixo, das palavras representativas do conteúdo do trabalho, isto é, palavras-chave e/ou descritores. Por fim, deve-se evitar, na redação do resumo, o uso de parágrafos (em geral resumos são escritos em parágrafo único), bem como de fórmulas, equações, diagramas e símbolos, optando-se, quando necessário, pela transcrição na forma extensa, além de não incluir citações bibliográficas.

Palavras-chave: Palavra-chave 1, Palavra-chave 2, Palavra-chave 3.

Lista de figuras

1	Teste de uma figura em formato .png.	p. 11
---	--	-------

Lista de tabelas

1	Tabela sem sentido.	p. 14
---	-----------------------------	-------

Lista de abreviaturas e siglas

UFRN – Universidade Federal do Rio Grande do Norte

DIMAp – Departamento de Informática e Matemática Aplicada

Sumário

1	Introdução	p. 8
1.1	Organização do trabalho	p. 8
2	Capítulo 2	p. 9
2.1	Estrutura e funções do módulo	p. 9
2.2	Operação interna e papel das expressões regulares	p. 10
2.3	Benefícios e ganhos do uso de regex em glicobiologia computacional . .	p. 12
2.4	Considerações finais	p. 12
3	Capítulo 3	p. 13
3.1	Seção 1	p. 14
3.2	Seção 2	p. 14
3.2.1	Subseção 2.1	p. 15
3.2.2	Subseção 2.2	p. 15
3.3	Seção 3	p. 15
4	Capítulo 4	p. 16
4.1	Seção 1	p. 16
4.2	Seção 2	p. 16
5	Capítulo 5	p. 17
5.1	Seção 1	p. 17
5.2	Seção 2	p. 17

5.2.1	Subseção 5.1	p. 17
5.2.2	Subseção 5.2	p. 18
5.3	Seção 3	p. 18
6	Considerações finais	p. 19
6.1	Principais contribuições	p. 19
6.2	Limitações	p. 19
6.3	Trabalhos futuros	p. 19
	Referências	p. 20
	Apêndice A – Primeiro apêndice	p. 21
	Anexo A – Primeiro anexo	p. 22

1 Introdução

A introdução é a parte inicial do texto e que possibilita uma visão geral de todo o trabalho, devendo constar a delimitação do assunto tratado, objetivos da pesquisa, motivação para o desenvolvimento da mesma e outros elementos necessários para situar o tema do trabalho.

1.1 Organização do trabalho

Nesta seção deve ser apresentado como está organizado o trabalho, sendo descrito, portanto, do que trata cada capítulo.

2 Capítulo 2

Neste capítulo, descreve-se o funcionamento do módulo *glycowork.motif.regex*, suas funções principais, a atuação das expressões regulares e as vantagens do uso desse sistema.

O módulo *glycowork.motif.regex*, introduzido por Bennett e Bojar (2024) no pacote *glycowork*, representa um avanço significativo na análise computacional de glicanos ao incorporar o uso de expressões regulares (RegEx) para identificação e extração de padrões estruturais complexos. Essa abordagem adapta a lógica das RegEx convencionais, amplamente utilizadas em ciência da computação, para detecção de padrões em cadeias de texto, ao contexto estrutural e não linear dos glicanos, permitindo buscas mais precisas e flexíveis em sequências de carboidratos.

2.1 Estrutura e funções do módulo

O módulo foi desenvolvido para permitir que pesquisadores expressem padrões estruturais de glicanos em uma forma análoga às expressões regulares de texto. Ele se baseia na tradução de padrões definidos em formato de expressão regular para operações de isomorfismo de subgrafos dentro das estruturas moleculares de glicanos. Quando o usuário fornece um padrão, por exemplo, um motivo glicosídico como $\text{Neu5Ac}\alpha 2\text{-3Gal}\beta 1\text{-4(Fuc}\alpha 1\text{-3)GlcNAc}$, o sistema decompõe esse padrão em unidades menores, chamadas de módulos homogêneos, correspondentes a monossacarídeos e ligações individuais. Cada módulo é então processado para identificar as possíveis correspondências no grafo do glicano, permitindo localizar subestruturas equivalentes de forma independente da forma textual em que o glicano foi representado. Isso é essencial, já que o módulo aceita múltiplos formatos de entrada, como WURCS, GlycoCT, Oxford, IUPAC-condensed e outras notações padronizadas.

As expressões regulares glicosídicas seguem uma lógica análoga à das regex textuais, com suporte a modificadores, quantificadores e operadores de busca contextual, como *lo-*

okahead e *lookbehind*. Isso permite definir quantas vezes um determinado monossacarídeo pode aparecer, se uma ligação é opcional ou se uma ramificação deve ocorrer em uma posição específica. O sistema aceita curingas, como o caractere “.” ou o termo **Monosaccharide**, que funcionam como substitutos para qualquer unidade estrutural. Os ramos das moléculas são representados por parênteses, e ligações específicas podem ser explicitadas, como em **Mana6** ou **Galb3/4**, o que permite uma descrição sintática detalhada da estrutura. Após o processamento dos módulos e operadores, o sistema percorre o grafo da molécula para traçar um caminho contínuo que satisfaça todas as condições da expressão regular, retornando as correspondências encontradas. Por padrão, o comportamento é “guloso”, ou seja, o sistema tenta encontrar o maior padrão possível, embora a execução “preguiçosa”, que busca o menor padrão que satisfaça a condição, também seja suportada com o modificador “?”.

Entre as principais funções do módulo destacam-se:

- **get_match()**: Busca e extrai trechos da estrutura do glicano que correspondem a um padrão definido pelo usuário.
- **get_pvals_motifs()**: Avalia o enriquecimento estatístico de motivos dentro de diferentes contextos estruturais, permitindo identificar padrões recorrentes em conjuntos de glicanos.
- **get_differential_expression()**: Analisa a expressão diferencial de motivos glicosídicos entre grupos de amostras, facilitando a identificação de variações significativas em estudos comparativos.

Essas funções se integram diretamente às demais ferramentas do pacote *glycowork*, como a **GlycoDraw**, que permite visualizar graficamente os motivos identificados, e os módulos de anotação e destaque de redes de motivos. Essa integração favorece a análise automatizada e a exploração visual das estruturas reconhecidas pelas expressões regulares.

A seguir, apresenta-se um exemplo ilustrativo de inclusão de figura no contexto do módulo.

2.2 Operação interna e papel das expressões regulares

O funcionamento interno do módulo envolve a tradução de padrões *Regex* em operações de subgrafo sobre as estruturas moleculares representadas como grafos. Em termos

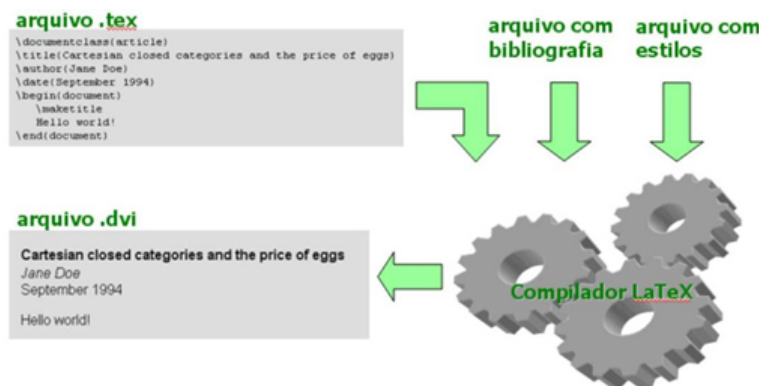


Figura 1: Teste de uma figura em formato .png.

gerais, o processo é dividido em etapas sucessivas que permitem converter descrições simbólicas de ligações e unidades monossacarídicas em estruturas compreensíveis computacionalmente.

Primeiramente, ocorre a segmentação do padrão, na qual a expressão *RegEx* fornecida é decomposta em módulos homogêneos, como unidades monossacarídicas ou ligações específicas. Por exemplo, o padrão "Neu5Ac α 2-3Gal β 1-4(Fuc α 1-3)GlcNAc" é dividido em blocos como "Neu5Ac α 2-3", "Gal β 1-4" e "Fuc α 1-3", representando diferentes segmentos estruturais que serão posteriormente analisados. Em seguida, ocorre a interpretação e expansão dos modificadores e quantificadores. Operadores como +, *, ?, intervalos {m,n} e quantificadores preguiçosos (+?) são suportados, permitindo definir repetições, ocorrências opcionais ou faixas de aparecimento dos motivos. Essa flexibilidade amplia a capacidade do módulo de reconhecer variações estruturais dentro de uma mesma família de glicanos. Posteriormente, aplica-se o processo de *subgraph isomorphism*, em que cada segmento é buscado dentro do grafo que representa a estrutura glicosídica. Essa etapa utiliza algoritmos de isomorfismo de subgrafos para identificar correspondências exatas, mesmo em representações complexas que envolvem ramificações e múltiplas conexões entre unidades.

Outro componente essencial é a implementação das operações de *lookahead* e *look-behind*, herdadas das expressões regulares textuais. Elas permitem incluir ou excluir determinados contextos do padrão de busca sem incorporá-los ao resultado final, sendo cruciais para capturar motivos cuja ocorrência depende de um contexto estrutural específico.

Por fim, ocorre a construção do caminho de correspondência, na qual um algoritmo iterativo reconstrói o trajeto contínuo dentro do grafo, unindo as correspondências parciais e validando os requisitos definidos pela expressão completa. Essa abordagem possibilita representar ligações específicas, como α 1-3 ou β 1-6, bem como ambiguidade estrutural e ramificações expressas por meio de parênteses. Dessa forma, a notação *RegEx* é adaptada

à topologia molecular, permitindo uma modelagem altamente expressiva e precisa das estruturas glicosídicas.

2.3 Benefícios e ganhos do uso de regex em glicobiologia computacional

2.4 Considerações finais

3 Capítulo 3

Algumas regras devem ser observadas na redação da dissertação/tese:

- ser claro, preciso, direto, objetivo e conciso, utilizando frases curtas e evitando ordens inversas desnecessárias;
- construir períodos com no máximo duas ou três linhas, bem como parágrafos com cinco linhas cheias, em média, e no máximo oito (ou seja, não construir parágrafos e períodos muito longos, pois isso cansa o(s) leitor(es) e pode fazer com que ele(s) percam a linha de raciocínio desenvolvida);
- a simplicidade deve ser condição essencial do texto; a simplicidade do texto não implica necessariamente repetição de formas e frases desgastadas, uso exagerado de voz passiva (como *será iniciado*, *será realizado*), pobreza vocabular etc. Com palavras conhecidas de todos, é possível escrever de maneira original e criativa e produzir frases elegantes, variadas, fluentes e bem alinhavadas;
- adotar como norma a ordem direta, por ser aquela que conduz mais facilmente o leitor à essência do texto, dispensando detalhes irrelevantes e indo diretamente ao que interessa, sem “rodeios” (verborragias);
- não começar períodos ou parágrafos seguidos com a mesma palavra, nem usar repetidamente a mesma estrutura de frase;
- desprezar as longas descrições e relatar o fato no menor número possível de palavras;
- recorrer aos termos técnicos somente quando absolutamente indispensáveis e nesse caso colocar o seu significado entre parênteses (ou seja, não se deve admitir que todos os que lerão o trabalho já dispõem de algum conhecimento desenvolvido no mesmo);
- dispensar palavras e formas empoladas ou rebuscadas, que tentem transmitir ao leitor mera ideia de erudição (até mesmo às vezes ilusória);

- não perder de vista o universo vocabular do leitor, adotando a seguinte regra prática: *nunca escrever o que não se diria*;
- termos coloquiais ou de gíria devem ser usados com extrema parcimônia (ou mesmo nem serem utilizados) e apenas em casos muito especiais, para não darem ao leitor a ideia de vulgaridade e descaracterizar o trabalho;
- ser rigoroso na escolha das palavras do texto, desconfiando dos sinônimos perfeitos ou de termos que sirvam para todas as ocasiões; em geral, há uma palavra para definir uma situação;
- encadear o assunto de maneira suave e harmoniosa, evitando a criação de um texto onde os parágrafos se sucedem uns aos outros como compartimentos estanques, sem nenhuma fluência entre si;
- ter um extremo cuidado durante a redação do texto, principalmente com relação às regras gramaticais e ortográficas da língua; geralmente todo o texto é escrito na forma impessoal do verbo, não se utilizando, portanto, de termos em primeira pessoa, seja do plural ou do singular.

Continuação do texto.

3.1 Seção 1

Teste de tabela.

Tabela 1: Tabela sem sentido.

Título Coluna 1	Título Coluna 2
Texto curto	Texto mais extenso, que requer mais de uma linha

3.2 Seção 2

Seção 2

3.2.1 Subseção 2.1

Referência à tabela definida no início: 3.1

3.2.2 Subseção 2.2

Texto a ser enumerado.

1. Item 1
2. Item 2, com nota explicativa¹
3. Item 3

3.3 Seção 3

Texto antes de equação.

$$x = y + z \tag{3.1}$$

Texto depois de equação.

¹Nota explicativa

4 Capítulo 4

4.1 Seção 1

Teste para símbolo

λ

4.2 Seção 2

Teste para abreviatura

UFRN

DIMAp

5 Capítulo 5

5.1 Seção 1

Seção 1

5.2 Seção 2

Alguns exemplos de citação:

Na tese de Doutorado de Paquete (PAQUETE, 2005), discute-se sobre algoritmos de busca local estocásticos aplicados a problemas de Otimização Combinatória considerando múltiplos objetivos. Por sua vez, o trabalho de (KNOWLES; CORNE; FLEISCHER, 2003), publicado nos anais do IEEE CEC de 2003, mostra uma técnica de arquivamento também empregada no desenvolvimento de algoritmos evolucionários multi-objetivo, trabalho esse posteriormente estendido para um capítulo de livro dos mesmos autores (KNOWLES; CORNE, 2004). Por fim, no relatório técnico de Jaszkiwicz (1998), fala-se sobre um algoritmo genético híbrido para problemas multi-critério, enquanto no artigo de jornal de Lopez *et al.* (LÓPEZ-IBÁÑEZ; PAQUETE; STÜTZLE, 2006) trata-se do *trade-off* entre algoritmos genéticos e metodologias de busca local, também aplicados no contexto multi-critério e relacionado de alguma forma ao trabalho de Jaszkiwicz (1998).

Outros exemplos relacionados encontram-se em (SILBERSCHATZ; KORTH; SUDARSHAN, 2002) (livro), (TURAU, 2001) (referência da Web) e (AGRA, 2004) (dissertação de Mestrado).

5.2.1 Subseção 5.1

Subseção 5.1

5.2.2 Subseção 5.2

Subsection 5.2

5.3 Seção 3

Seção 3

6 Considerações finais

As considerações finais formam a parte final (fechamento) do texto, sendo dito de forma resumida (1) o que foi desenvolvido no presente trabalho e quais os resultados do mesmo, (2) o que se pôde concluir após o desenvolvimento bem como as principais contribuições do trabalho, e (3) perspectivas para o desenvolvimento de trabalhos futuros, como listado nos exemplos de seção abaixo. O texto referente às considerações finais do autor deve salientar a extensão e os resultados da contribuição do trabalho e os argumentos utilizados estar baseados em dados comprovados e fundamentados nos resultados e na discussão do texto, contendo deduções lógicas correspondentes aos objetivos do trabalho, propostos inicialmente.

6.1 Principais contribuições

Texto.

6.2 Limitações

Texto.

6.3 Trabalhos futuros

Texto.

Referências

- AGRA, A. Projeto de Diplomação, *Implementação de uma Proposta para Atualização de Bancos de Dados através de Visões*. Porto Alegre, RS, Brasil: [s.n.], jul. 2004.
- JASZKIEWICZ, A. *Genetic local search for multiple objective combinatorial optimization*. [S.l.], 1998.
- KNOWLES, J.; CORNE, D. Metaheuristics for multiobjective optimisation. In: _____. [S.l.]: Springer, 2004. (Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, v. 535), cap. Bounded Pareto Archiving: Theory and Practice, p. 39–64.
- KNOWLES, J. D.; CORNE, D. W.; FLEISCHER, M. Bounded archiving using the Lebesgue measure. In: *Proceedings of the IEEE Congress on Evolutionary Computation*. [S.l.]: IEEE Press, 2003. p. 2490–2497.
- LÓPEZ-IBÁÑEZ, M.; PAQUETE, L.; STÜTZLE, T. Hybrid population-based algorithms for the bi-objective quadratic assignment problem. *Journal of Mathematical Modelling and Algorithms*, v. 5, n. 1, p. 111–137, 2006.
- PAQUETE, L. *Stochastic Local Search Algorithms for Multiobjective Combinatorial Optimization Problems: Methods and Analysis*. Tese (Doutorado) — Technische Universität Darmstadt, 2005.
- SILBERSCHATZ, A.; KORTH, H. F.; SUDARSHAN, S. *Database system concepts*. 4th. ed. Boston: McGraw-Hill, 2002.
- TURAU, V. *DB2XML 1.4: Transforming relational databases into XML documents*. out. 2001. Out., 2001. Disponível em: <<http://www.informatik.fh-wiesbaden.de/~turau/DB2XML/index.html>>. Acesso em Abril 9, 2004.

APÊNDICE A – Primeiro apêndice

Os apêndices são textos ou documentos elaborados pelo autor, a fim de complementar sua argumentação, sem prejuízo da unidade nuclear do trabalho.

ANEXO A – Primeiro anexo

Os anexos são textos ou documentos não elaborado pelo autor, que servem de fundamentação, comprovação e ilustração.