

Workshop: Transformação Digital na Saúde com Inteligência Artificial (IA)

Andreia Gaudêncio

PhD Eng. Biomédica | Suporte & Dados

Lisboa - 23 de Abril 2026

agaudencio@acnca.pt



Rede WIFI

- Rede: Eventos TTC
- Password: **fhd22Hlr**



Agenda

Inteligência Artificial na Saúde

Machine Learning (ML) na Saúde

LLMs & Saúde

Hands-on

Exemplo de ML

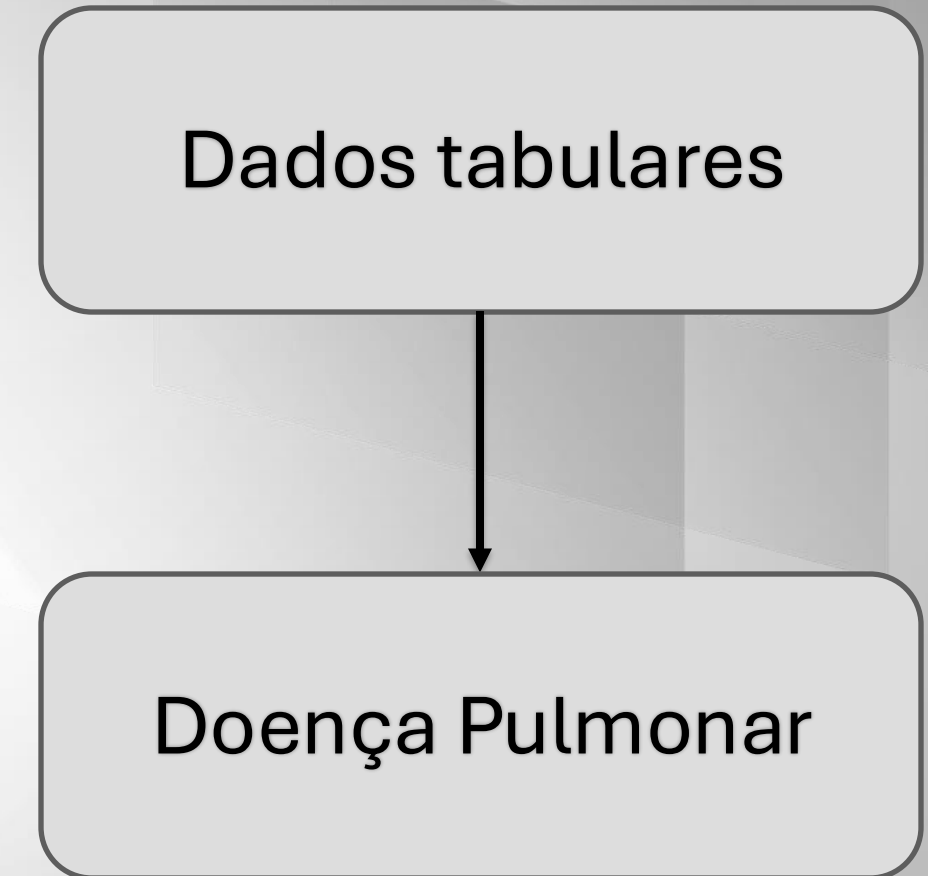
Como desenvolver um Health AI Assistant

Como tratar um dataset para raciocínio clínico?

Inteligência Artificial (IA) na Saúde

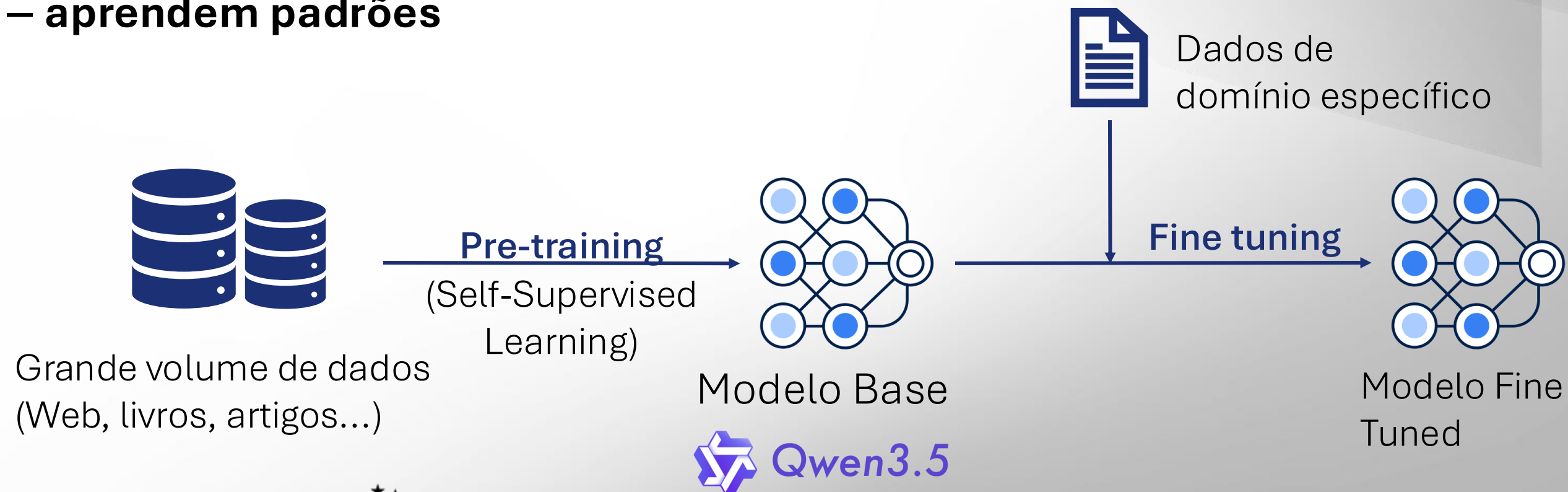
Machine Learning na Saúde

- **Deteção e predição de doenças**
 - detetar tumores e outras anomalias em imagens médicas
- **Personalização de tratamento**
 - predição do tratamento mais eficaz
- **Desenvolvimento de fármacos**
 - com informação genética, estruturas de proteínas, interações moleculares, prevêm-se interações com diferentes proteínas alvo



Large Language Models (LLMs)

- Arquitetura com grande número de parâmetros
- Processa e produz linguagem natural
- Modelos matemáticos que aprendem a partir de dados
 - aprendem padrões



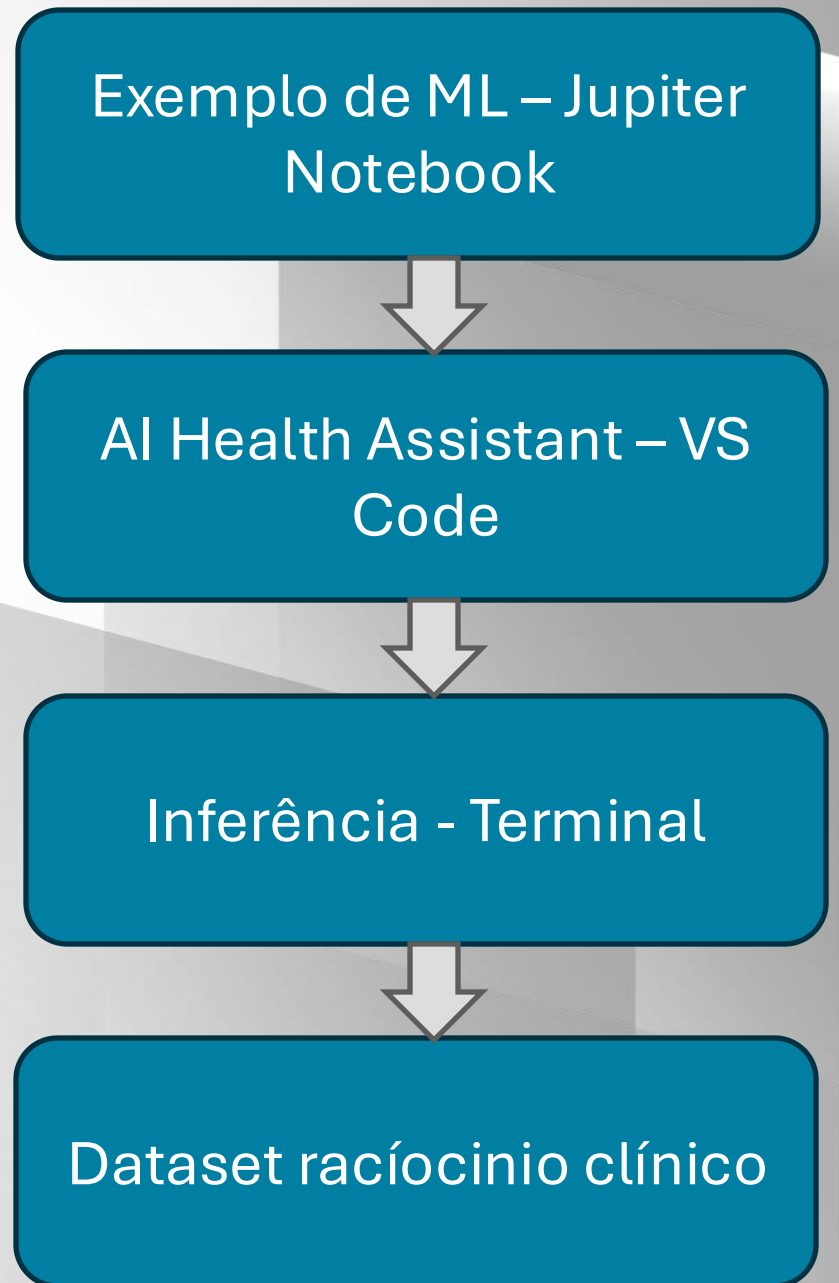
LLMs & saúde

- BioGPT
- ClinicalBert
- MedLM
- SciBert
- ImageBert

Texto	Imagens	Dados estruturados	Video
Notas clínicas, artigos científicos, instruções para pacientes, códigos médicos	Raios-X, TACs, RM	Resultados de laboratório, bioassinais, ECG, EEG, e dados demográficos	Vídeos cirúrgicos, modelos médicos 3D

Hands-on

<https://indico.acnca.pt/event/8/>



DEUCALION



Minho Advanced Computing Center (MACC),
Guimarães





Exemplo prático de Machine Learning (ML)



Exemplo de Machine Learning

<https://gitlab.a.incd.pt/cnca/aif-pt/ml-lung-disease-pred>

Workshop: Transformação Digital na Saúde com IA
Fábrica de IA | Centro Nacional de Computação Avançada (CNCA)

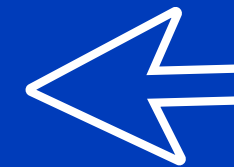


Objetivo: Predição de cancro pulmonar - exemplo prático de Machine Learning
Dataset: dataset de domínio público obtido via [kaggle](#)

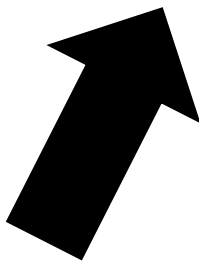
Primeiros passos

1. Abrir página de Open OnDemand (OOD) do Deucalion

[Deucalion's OOD](#)



2. Copiar os materiais do repositório



OnDemand provides an integrated, single access point for all of your HPC resources.

Message of the Day

Changelog

- **07/01/2026:** Deucalion now has a chatbot that goes through our documentation and can answer some basic questions that you might have. To access it please run `module load chat` followed by `deucalion_chat`
- **10/12/2025:** Deucalion has now a private [GitLab](#) server providing a [CI/CD service](#) to all users.

Deucalion

Files ▾

Jobs ▾

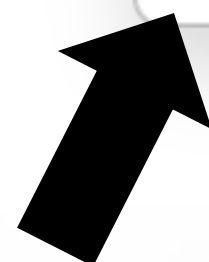
Clusters ▾

Interactive Apps ▾

🏠 Home Directory

📁 /projects/F2026AIVLAB00021BSCAIF

/projects/F2026AIVLAB00021BSCAIF



>_ Open in Terminal | ↻ Refresh | + New File | 📁 New Directory | ⬆️ Upload | ⬇️ Download | 📄 Copy/Move | 🗑️ Delete

🏠 Home Directory

📁 /projects/F2026AIVLAB00021BSCAIF



/ projects / F2026AIVLAB00021BSCAIF /

📄 Change directory

📄 Copy path

Show Owner/Mode Show Dotfiles Filter:

Showing 0 rows - 0 rows selected

<input type="checkbox"/>	Type ▲	Name	Size	Modified at
No data available in table				

powered by



OnDemand version: 4.0.7

Welcome to the Portuguese EuroHPC supercomputer, *please* read documentation before use:
<https://docs.macc.fccn.pt/>

The following scripts are now available for user reference:

1. Home Quota Check: `quotahome`
2. Lustre (projects) Quota Check: `quotaprojects`
3. Slurm Billing Information: `billing`

Run these scripts directly to get up-to-date information on your storage usage and job-related billing.

```
[agaudencio@ln04 F2026AIVLAB00021BSCAIF]$
```

```
[agaudencio@ln03 F2026AIVLAB00021BSCAIF]$ bash ml_repo.sh
```

```
Cloning into 'agaudencio/ml-example'...
```

```
warning: redirecting to https://gitlab.acnca.pt/cnca/aif-pt/ml-lung-disease-pred.git/
```

```
remote: Enumerating objects: 94, done.
```

```
remote: Counting objects: 100% (57/57), done.
```

```
remote: Compressing objects: 100% (57/57), done.
```

```
remote: Total 94 (delta 25), reused 0 (delta 0), pack-reused 37 (from 1)
```

```
Unpacking objects: 100% (94/94), 1.27 MiB | 2.79 MiB/s, done.
```

```
[agaudencio@ln03 F2026AIVLAB00021BSCAIF]$
```

Deucalion Files Jobs Clusters Interactive Apps My Interactive Sessions

Home Directory
/projects/F2026AIVLAB00021BSCAIF

AI
Llama.cpp

Desktops
Desktop

Editors
VS Code

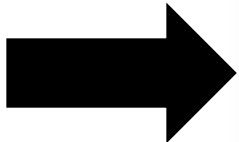
GUIs
VAPOR
VMD

Servers
Jupyter Notebook
 Jupyter Notebook Pytorch
 Jupyter Notebook Pytorch (GPU)
 RStudio Server
 mlflow

Viz
TensorBoard

/ projects / F2026AIVLAB00021BSCAIF /

Type ▲
Folder
Folder
Folder
Folder
Folder
Folder
Folder
Folder
Folder
Folder



Saved Settings

You have no saved settings.

Interactive Apps

- AI
- Llama.cpp
- Desktops
- Desktop
- Editors
- VS Code
- GUIs
- VAPOR
- VMD
- Servers
- Jupyter Notebook**
- Jupyter Notebook Pytorch
- Jupyter Notebook Pytorch (GPU)
- RStudio Server
- mlflow
- Viz
- TensorBoard

Jupyter Notebook

This app will launch a Jupyter Notebook server on one or more nodes.

Number of CPU cores

Enter a value between 1 and 256

Number of hours

Partition

Please select a queue from the drop-down

Account

Save settings

* The Jupyter Notebook session data for this session can be accessed under the [data root directory](#).

Session was successfully created. ✕

Home / My Interactive Sessions

Saved Settings
You have no saved settings.

Interactive Apps

- AI
- Llama.cpp
- Desktops
- Desktop
- Editors
- VS Code
- GUIs
- VAPOR
- VMD
- Servers
- Jupyter Notebook
- Jupyter Notebook Pytorch
- Jupyter Notebook Pytorch (GPU)
- RStudio Server
- mlflow
- Viz
- TensorBoard

Jupyter Notebook (1106817) 1 node | 48 cores | Starting

Created at: 2026-03-31 11:57:34 WEST ✕ Cancel

Time Remaining: 59 minutes

Session ID: 2cfa2ede-265e-418f-86cf-97f4ddeba0a8

Your session is currently starting... Please be patient as this process can take a few minutes.



Jupyter Notebook (1106817) 1 node | 48 cores | Running

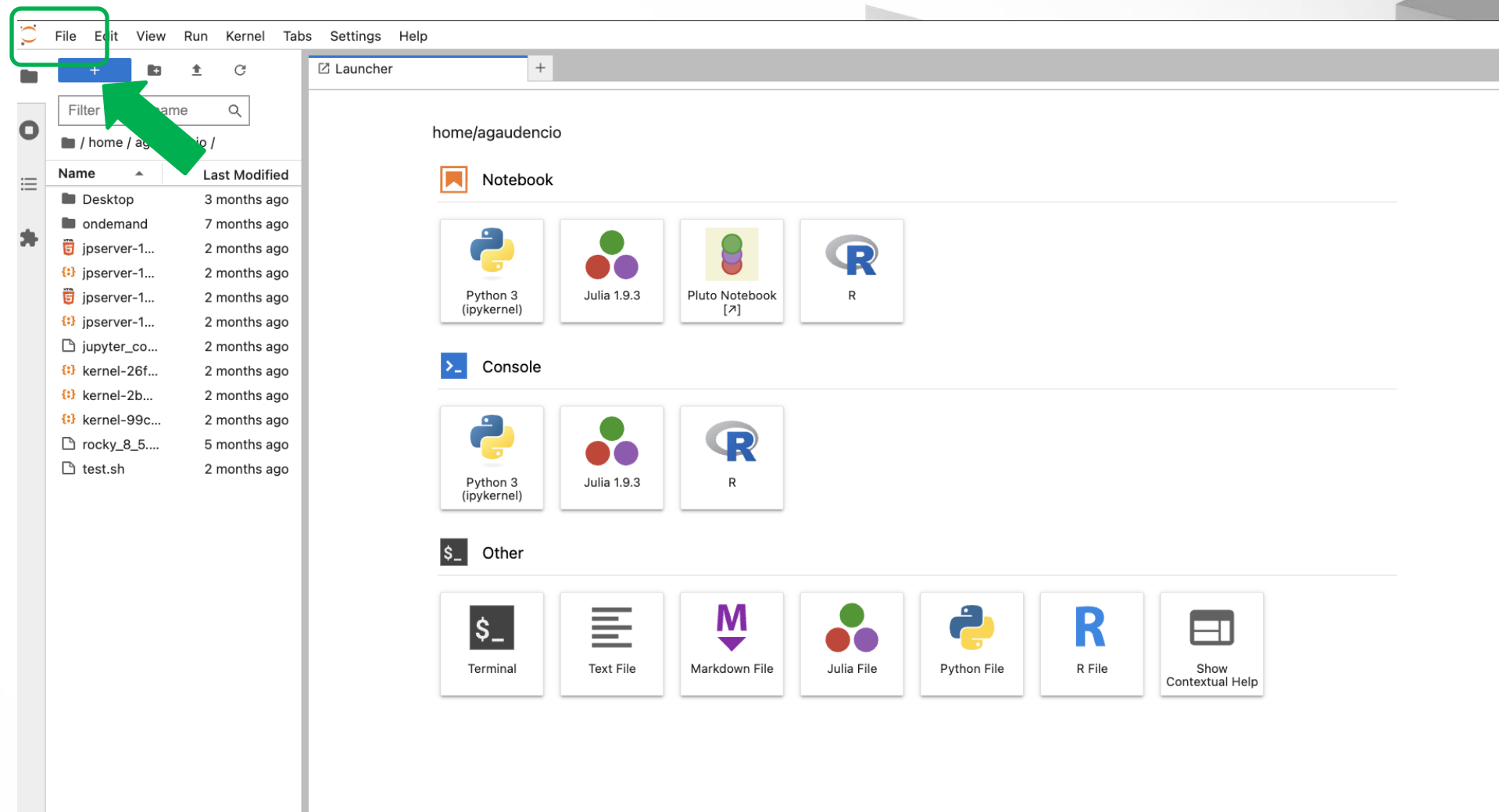
Host: cna0044.deucalion.macc.fccn.pt ✕ Cancel

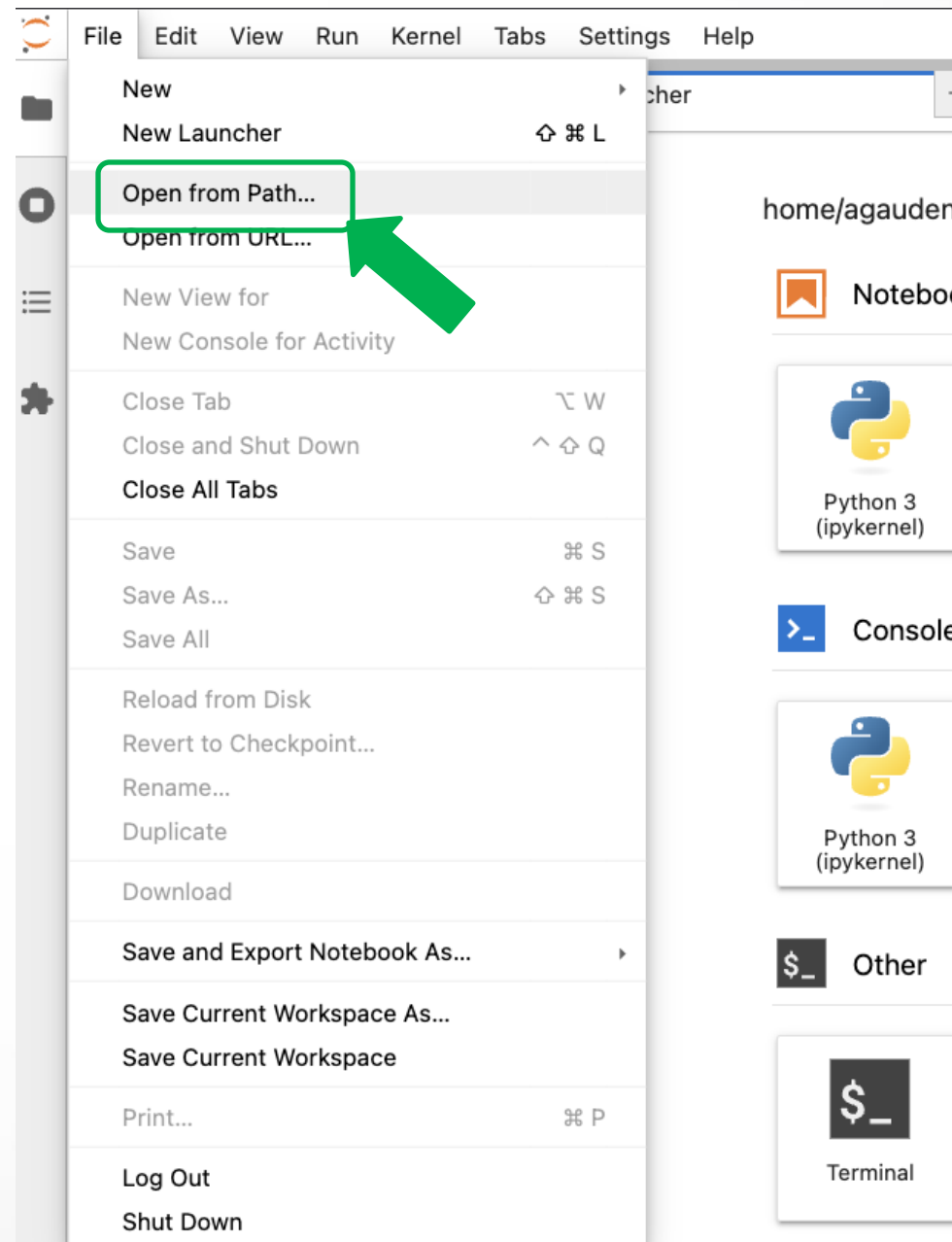
Created at: 2026-03-31 11:57:34 WEST

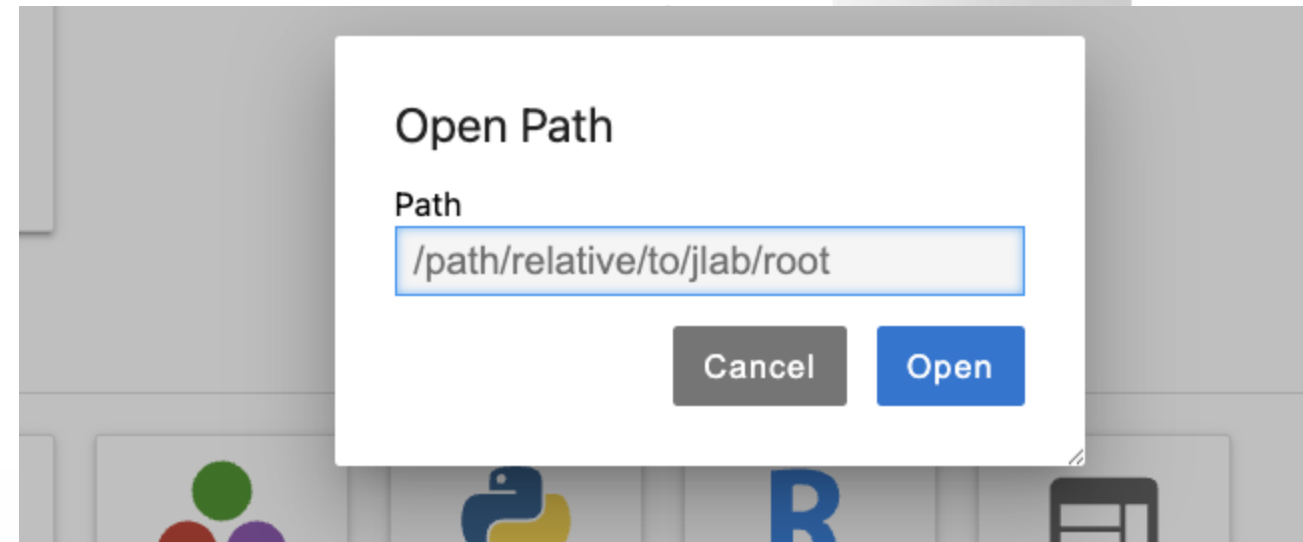
Time Remaining: 58 minutes

Session ID: 2cfa2ede-265e-418f-86cf-97f4ddeba0a8

[Connect to Jupyter](#)







/projects/F2026AIVLAB00021BSCAIF/NOME_USER/ml-example

File Edit View Run Kernel Tabs Settings Help

Filter files by name

/ ... / agaudencio / ml-example /

Name	Last Modified
dataset	5 minutes ago
images	5 minutes ago
graphics.py	5 minutes ago
ml_health_example.ipynb	5 minutes ago
README.md	5 minutes ago
results_functions.py	5 minutes ago


Launcher ml_health_example.ipynb Python 3 (ipykernel)

Markdown

Workshop: Tendências Digitais para a Saúde

Fábrica de IA | Centro Nacional de Computação Avançada (CNCA)

Andreia Gaudêncio




Objetivo: Predição de cancro pulmonar - exemplo prático de Machine Learning

Dataset: dataset de domínio público obtido via [kaggle](#)

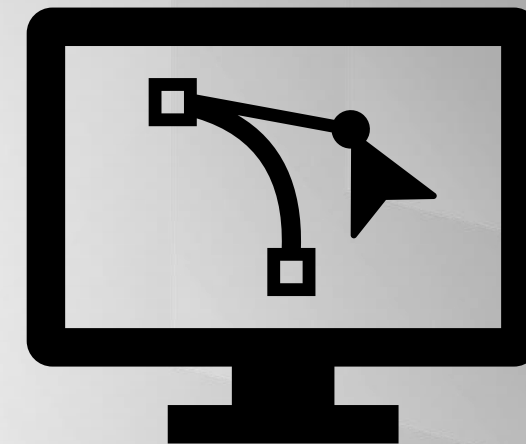
Simple 0 2 Python 3 (ipykernel) | Idle

Mode: Command Ln 1, Col 1 ml_health_example.ipynb 1

Would you like to receive official Jupyter news? Please read the privacy policy. [Open privacy policy](#) Yes No



Como treinar um assistente de IA para a saúde: desde os dados ao fine-tuning



Método

- **Dataset público**
 - **Modelo: Qwen 3.5-9B**
 - **Container:** Pytorch, Cuda, Transformer, PEFT, TRL, Datasets, Optuna
1. Curar os dados
 1. Curadoria inicial
 2. Filtragem
 3. Consolidação/Merge
 2. Otimização de hiperparâmetros com *optuna*
 3. Fine-tuning final do modelo com hiperparâmetros *LORA* selecionados
 4. **Comparação modelo base com o modelo fine-tuned**



Hugging Face



Qwen3.5



OPTUNA

LORA (Low-Rank Adaption)

- Evita ajustar todos os parâmetros do modelo base
- Treina apenas alguns parâmetros adicionais (adapter)
- Eficiente
- Evita risco de "catastrophic forgetting"

Full fine-tuning implicaria treinar os parâmetros todos!

LoRA

low rank $r \ll n$

$$W = W_0 + \underbrace{A}_{\text{trainable}} \underbrace{B}_{\text{trainable}}$$

Fonte

Total params: 8,559,815,680 (31.89 GB)
Trainable params: 22,134,784 (84.44 MB)
Non-trainable params: 8,537,680,896 (31.81 GB)

Optuna

- Permite procurar de forma mais eficiente os hiperparâmetros
- **5 testes** (N_TRIALS) para obter a melhor combinação de parâmetros
 - Lora_r, Lora_alpha, Lora_dropout, Learning_rate

```
lora_r = trial.suggest_int("lora_r", 8, 56, step=16)
lora_alpha = trial.suggest_int("lora_alpha", 16, 64, step=16)
lora_dropout = trial.suggest_float("lora_dropout", 0.01, 0.1)
learning_rate = trial.suggest_float("learning_rate", 1e-5, 5e-4, log=True)
```

1. Curar os dados

1. **Curadoria Inicial** → Limpeza automatizada + validação manual
2. **Filtragem** → Reestruturação assistida por LLM e filtragem por qualidade
3. **Consolidação (*Merge*)** → Consolidação e montagem final do conjunto de dados e integração de revisões

1.1. Curadoria inicial

Terminal:

```
[user@ln03 F2026AIVLAB00021BSCAIF]$ cd ai-assist #cd=abrir pasta  
[user@ln03 ai-assist]$ ls # lista o conteúdo da pasta (opcional)  
[user@ln03 F2026AIVLAB00021BSCAIF]$ cd 1.Initial-curation  
[user@ln03 1.Initial-curation]$ sbatch run-curation.sh
```

Nota: Após obter este dataset foi ainda feita verificação manual!!!!

1.1. Curadoria inicial

A. Script: `curate_dataset.py`

- Limpeza de texto
- Remoção de frases redundantes
 - *Hope this helps*
 - *Hope this answers*
 - *Have a nice day*
- Filtros de qualidade: tamanho da resposta, entradas duplas

B. Validação manual: revisão para garantir uma maior precisão

1.2. Filtrar dados

1. Filtragem de Qualidade Automática

- Valida estrutura: mensagens (user + assistant)
- Verifica comprimento da resposta (25–150 palavras)
- Rejeita frases com padrões perigosos (*ex: dosagens específicas*)
- Remove frases proibidas: *no need to worry, hope this helps, let me know*

2. Amostragem estratificada

- Distribuição dos 500 exemplos selecionados

1.2. Filtrar dados

3. Reescrita com o Qwen 3.5-2B

- LLM reescreve respostas e corrige erros estruturais/de formatação
- Prompt de sistema rígido
- Validação pós-geração

Terminal:

```
[user@ln03 1.Initial-curation]$ cd .. #regressa à pasta anterior
```

```
[user@ln03 ai-assist]$ cd 2.Filter
```

```
[user@ln03 2.Filter]$ sbatch run-filter.sh
```

1.3. Consolidação e montagem final

- 120 exemplos para revisão manual
- Adicionadas entradas que correspondem aos critérios
- **Total de 451 exemplos finais**

Terminal:

```
[user@ln03 2.Filter]$ cd ..
```

```
[user@ln03 ai-assist]$ cd 3.Merge
```

```
[user@ln03 2.Filter]$ sbatch run-merge.sh
```

1. Curar os dados - exemplo

```
{ "messages": [ { "role": "system", "content": PROMPT },
```

```
  { "role": "user", "content": "I have a long history of chronic sinusitis, I even have had septum and sinus surgery before, (...) I feel like there is a constriction and weight above my eyes causing bad headaches, dark circles, eye strain, etc. I am currently taking asterpro and mucinex. (...)" },
```

```
  { "role": "assistant", "content": "Seek emergency care immediately if you experience severe vision changes or chest pain. Your symptoms suggest a potential neurological or vascular issue rather than simple allergy, as your headaches and dark circles persist despite medication. Please consult a doctor for more personalized medical advice." } ], (...)
```

2. Otimização de hiperparâmetros

- Execução de um job: **sbatch run-ft-optuna.sh**
 - Ficheiro para otimizar parâmetros do modelos: **fine-tuning-optuna.py**

Terminal:

```
[user@ln03 ai-assist]$ cd fine-tuning
```

```
[user@ln03 fine-tuning]$ sbatch run-ft-optuna.sh
```

```
Submitted batch job 1106412
```

3. Fine-tuning (final)

- Execução do job `run-ft.sh` utilizando os melhores parâmetros do passo anterior
 - Executa o ficheiro `simple-fine-tuning.py`

```
[user@ln03 fine-tuning]$ sbatch run-ft.sh
```

```
Submitted batch job 1106412
```

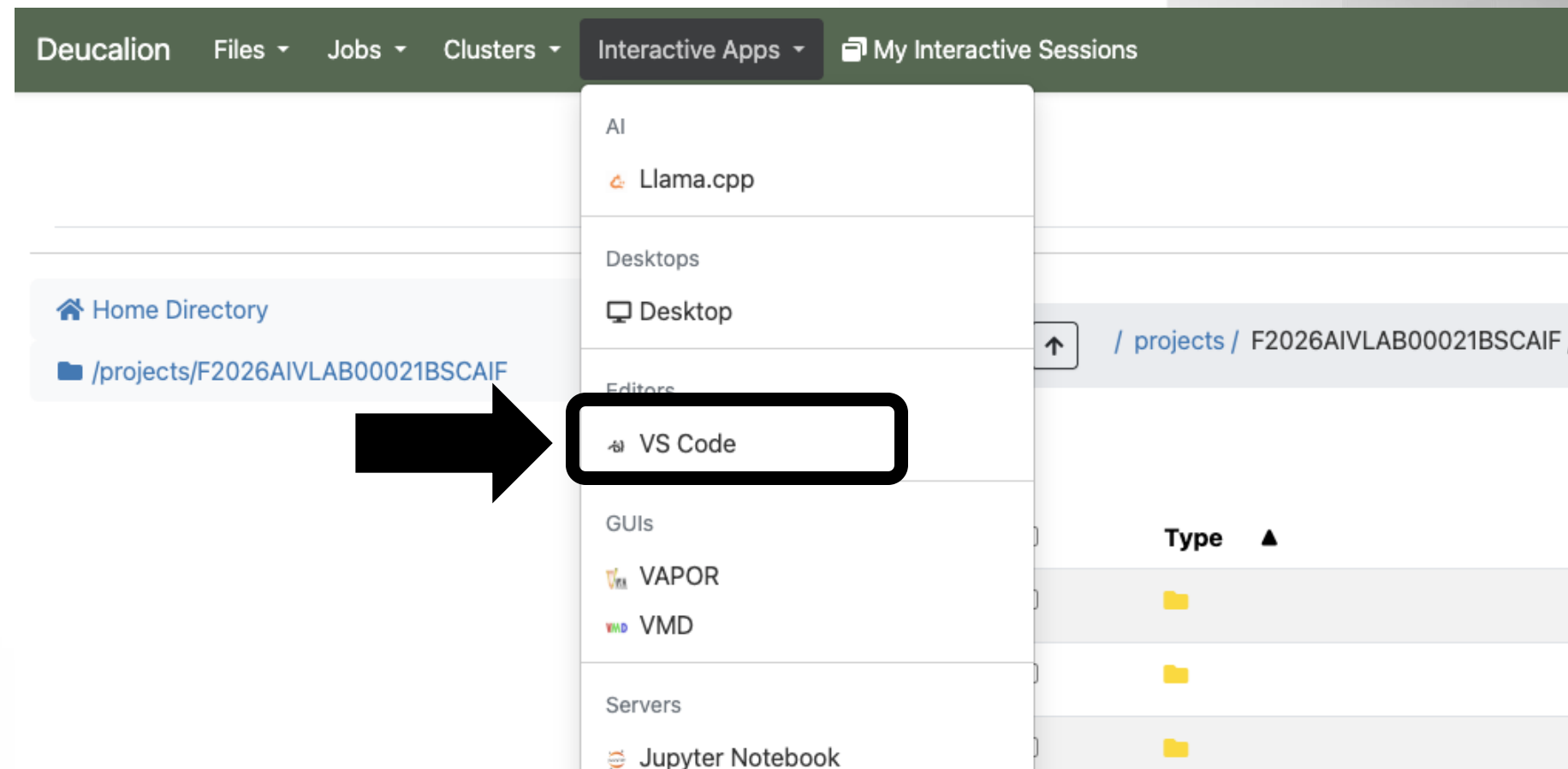
Repositório para o Assistente de IA na saúde



<https://gitlab.a.incd.pt/cnca/aif-pt/health-ai-ft>

```
[user@ln03 F2026AIVLAB00021BSCAIF]$ cat hai_repo.sh #ver o
conteúdo do ficheiro
[user@ln03 F2026AIVLAB00021BSCAIF]$ bash hai_repo.sh
```

Scripts e método



Saved Settings

You have no saved settings.

Interactive Apps

- AI
- Llama.cpp
- Desktops
- Desktop
- Editors
- VS Code**
- GUIs
- VAPOR
- VMD
- Servers
- Jupyter Notebook
- Jupyter Notebook Pytorch
- Jupyter Notebook Pytorch (GPU)
- RStudio Server
- mlflow
- Viz
- TensorBoard

VS Code

Browser-based Visual Studio Code running inside a Singularity container on the *ooda* partition.

Number of CPU cores

2

Number of hours

1

Partition

Non-exclusive ARM

Account

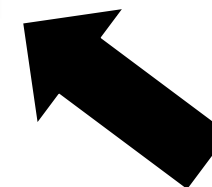
f2026aivlab00021bscaifa

Save settings

Save settings and close

Launch

* The VS Code session data for this session can be accessed under the [data root directory](#).



Session was successfully deleted.

Home / My Interactive Sessions

Saved Settings

You have no saved settings.

Interactive Apps

- AI
- Llama.cpp
- Desktops
- Desktop
- Editors
- VS Code
- GUIs
- VAPOR

VS Code (1132972)

1 node | 2 cores | Starting

Created at: 2026-04-09 16:31:04 WEST

Cancel

Time Remaining: 59 minutes

Session ID: 0b7e2d18-6e47-401d-90c1-2d3a47bad0f9

Your session is currently starting... Please be patient as this process can take a few minutes.

Session was successfully deleted.

Home / My Interactive Sessions

Saved Settings

You have no saved settings.

Interactive Apps

- AI
- Llama.cpp
- Desktops
- Desktop
- Editors
- VS Code
- GUIs
- VAPOR

VS Code (1132972)

1 node | 2 cores | Running

Host: cna0017.deucalion.macc.fccn.pt

Created at: 2026-04-09 16:31:04 WEST

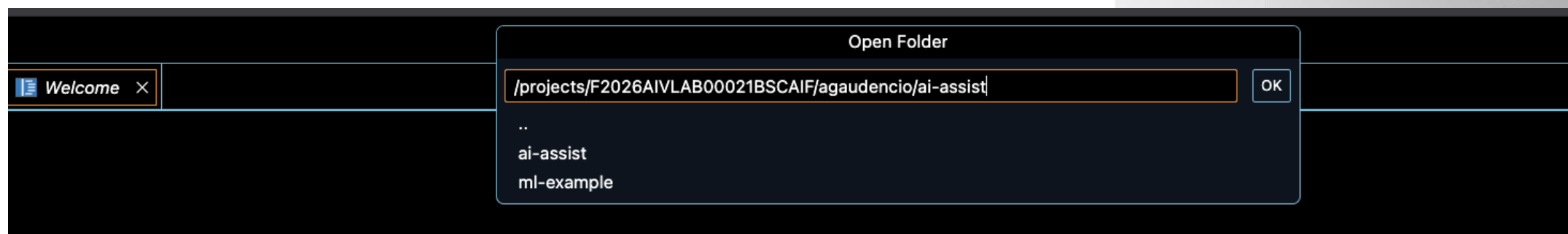
Time Remaining: 59 minutes

Session ID: 0b7e2d18-6e47-401d-90c1-2d3a47bad0f9

Cancel

Connect to code-server





/projects/F2026AIVLAB00021BSCAIF/NOME_USER/ai-assist

4. Comparar modelo base e fine-tuned

```
[user@ln03 fine-tuning]$ cat gpu.sh
```

```
#!/bin/bash
```

```
# open interactive session limited to 10 minutes
```

```
salloc -A f2026aivlab00021bscaifg --gpus=1 -t 00:10:00 -p normal-a100-40
```

```
[user@ln03 fine-tuning]$ bash gpu.sh
```

```
[user@ln03 gn004]$ bash run-inference.sh 'base'
```


4. Comparar modelo base e fine-tuned

```
[user@ln03 gnx004]$ bash run-inference.sh 'ft'
```

Testar com:

I have a mild headache and feel a bit tired. What should I do?

I'm having chest pain that radiates to my left arm and I'm short of breath.

My 3-year-old has had a fever of 101.5°F for two days. She's drinking fluids but not eating. Should I be worried?

I've been feeling down lately and can't sleep well.

Como tratar um dataset para raciocínio clínico?



Dataset para tarefas de raciocínio clínico

- Projeto de MSc de Beatriz Ramada Macedo
 - Orientado por António Luís Sousa, PhD e Alícia Oliveira, PhD candidate
 - HASLab (Laboratório de Software Confiável)

Dados
farmacológicos
brutos



Q&A

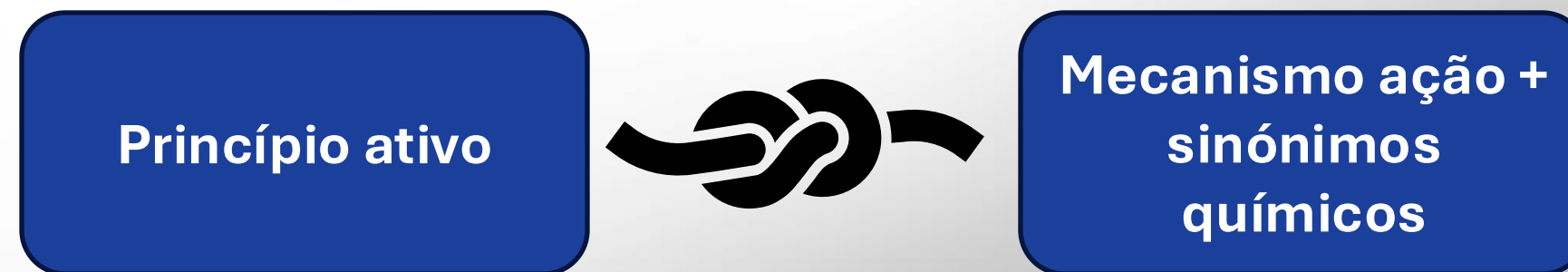
Preparação do dataset

1. Limpeza e normalização dos dados (tabulares)

- Remoção de colunas irrelevantes, de registos incompletos ou recomendações como “You need to take it regularly...”

2. Cruzamento e enriquecimento dos dados

- O dataset (medicamentos comerciais, indicações terapêuticas e efeitos adversos) foi cruzado com o DrugBank



Preparação do dataset

3. Divisão dos dados

- Separação em treino/teste com chave **[Primeira Palavra do Medicamento] + [Composição Base]**

4. Estruturação em tarefas de Question Answering



Identificação do
perfil clínico

Raciocínio
terapêutico

Inventário
farmacológico

Farmacodinâmica

Preparação do dataset

5. Prevenção de fuga de dados (data leakage)

- Remoção de exemplos no grupo de teste com mecanismo de ação associado a um princípio ativo dos conjuntos de treino e desenvolvimento.
- Redução do risco de memorização de relações farmacodinâmicas

Quickstart da Fábrica de IA

<https://baif-quickstart-081a21.gitlab.io/>



**Inscrição na
BSC AI Factory**