

69

CONGRESO NACIONAL

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE FARMACIA HOSPITALARIA

A CORUÑA

17-19 OCT 24

METODOLOGÍA NOCODE PARA EL DESARROLLO DE PRODUCTOS DIGITALES APLICADO A FARMACIA HOSPITALARIA

Caso de Uso: IA



IVÁN MARAY MATEOS

*F.E.A. Farmacia Hospitalaria
Hospital Universitario Central de Asturias, Oviedo*



Casos de Uso en IA

IA GENERATIVA



CASO 1. INTERMEDIO

**Asistente de gestión de
Ofertas en un SFH**

MACHINE LEARNING



CASO 2. AVANZADO

**Modelo ML de
predicción de niveles
tóxicos o
subterapéuticos de
voriconazol**

Casos de Uso en IA

IA
GENERATIVA



IA generativa y LLM

Un Modelo de Lenguaje de Gran Escala (Large Language Model) es un tipo de Modelo Fundacional que comprende y genera texto humano.

Entrenados con gran cantidad de texto y patrones de lenguaje, gramática, conocimiento general y estilos de escritura.

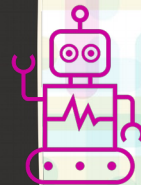
Traducen, responden preguntas, resumen documentos y generan contenido nuevo.

Imagina que tienes un compañero que ha leído millones de libros, artículos y páginas web y puede recordar y usar esa información para mantener una conversación.



Parecen inteligentes, pero no tienen comprensión real del mundo.

Predice qué palabra debería venir después, dado el texto que ha recibido





GPTs

Discover and create custom versions of ChatGPT that combine instructions, extra knowledge, and any combination of skills.

🔍 Search public GPTs

Top Picks DALL·E Writing Productivity Research & Analysis Programming Education Lifestyle

Featured

Curated top picks from this week



Wolfram

Access computation, math, curated knowledge & real-time data from Wolfram|Alpha and Wolfram...

By gpt.wolfram.com



ElevenLabs Text To Speech

Convert text into lifelike speech with ElevenLabs (limited to 1,500 characters)

By Ammaar Reshi



Whimsical Diagrams

Explains and visualizes concepts with flowcharts, mindmaps and sequence diagrams.

By whimsical.com



Consensus

Your AI Research Assistant. Search 200M academic papers from Consensus, get science-based...

By consensus.app

Trending

Most popular GPTs by our community

1 

Image generator

A GPT specialized in generating and refining images with a mix of professional and friendly tone.image generator

By NAIF J ALOTAIBI

2 

Logo Creator

Use me to generate professional logo designs and app icons!

By Chase Lean

Canva

Cartoonize Yourself

Crear versiones de ChatGPT con:

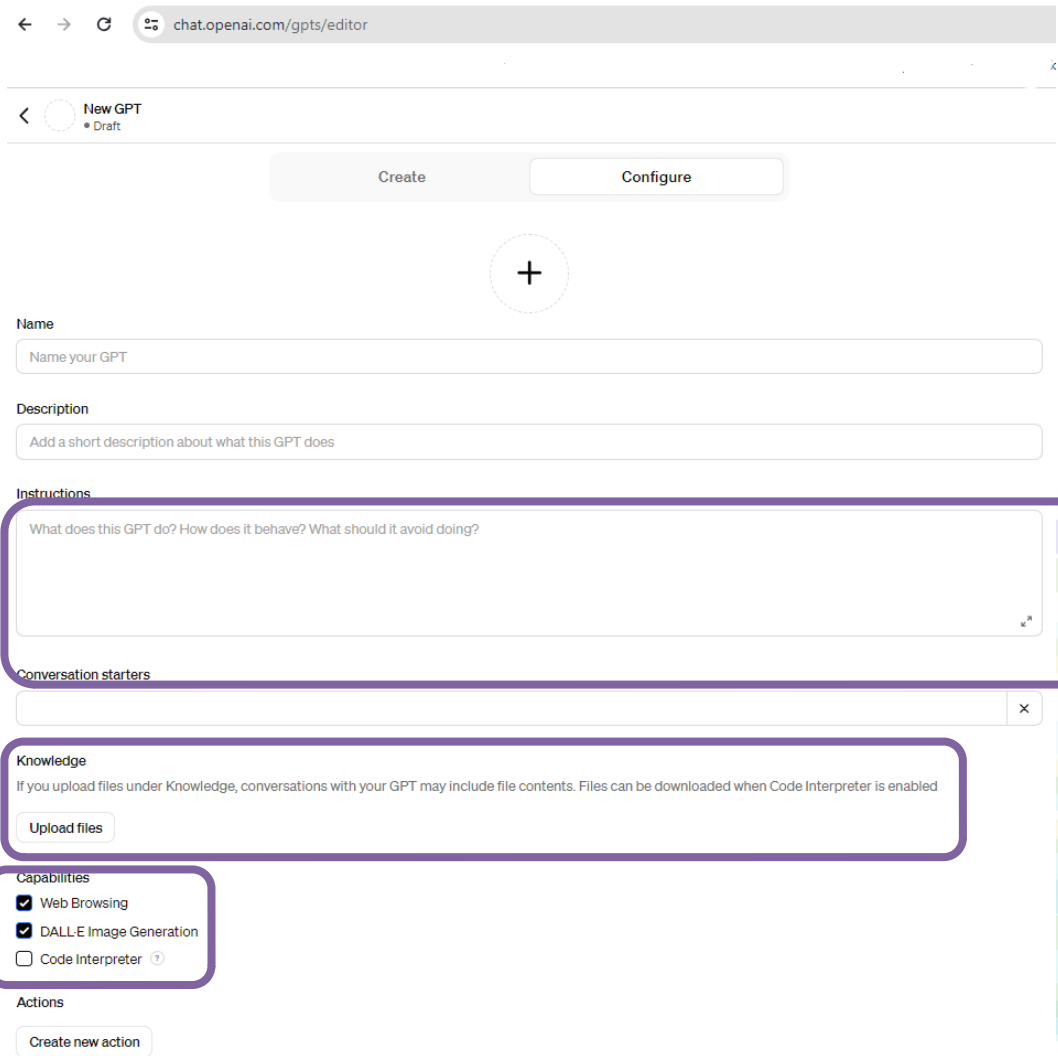
- instrucciones específicas
- conocimiento adicional
- combinación de habilidades
- flexibilidad de los modelos GPT para ser ajustados a necesidades particulares

Creación de GPTs

Capabilities

- Web Browsing
- DALL·E Image Generation
- Code Interpreter [?]

Allow this GPT to run code. When enabled, this GPT can analyze data, work with files you've uploaded, do math, and more.



The screenshot shows the OpenAI GPTs editor interface. At the top, the browser address bar displays "chat.openai.com/gpts/editor". Below the address bar, there are navigation arrows and a "New GPT" button with a "Draft" indicator. Two main buttons, "Create" and "Configure", are visible. A large circular button with a "+" sign is centered on the page. Below this, the "Name" field contains the placeholder "Name your GPT". The "Description" field contains the placeholder "Add a short description about what this GPT does". The "Instructions" field is highlighted with a purple border and contains the text "What does this GPT do? How does it behave? What should it avoid doing?". Below the instructions, there is a "Conversation starters" section with a text input field and a close button. The "Knowledge" section is also highlighted with a purple border and contains the text "If you upload files under Knowledge, conversations with your GPT may include file contents. Files can be downloaded when Code Interpreter is enabled" and an "Upload files" button. The "Capabilities" section is highlighted with a purple border and shows three options: "Web Browsing" (checked), "DALL·E Image Generation" (checked), and "Code Interpreter" (unchecked). The "Actions" section at the bottom has a "Create new action" button.

Casos de Uso en IA

IA GENERATIVA



CASO 1. INTERMEDIO

Asistente de gestión de Ofertas en un SFH



Casos prácticos de aplicación

Gestión de ofertas



Gestión de ofertas

Create

Configure



Name

Ofertas_FH

Description

Add a short description about what this GPT does

Instructions

Eres el asistente de un jefe de servicio de Farmacia Hospitalaria. Tu objetivo principal es analizar ofertas. Para ello te voy a suministrar documentos que pueden estar en pdf, word o excel, y quiero que de cada uno de ellos me extraigas la información que quiero para que luego puedas crear un archivo xlsx con los siguientes campos:

-Medicamento: nombre del principio activo y entre paréntesis el nombre comercial si aparece, por ejemplo Rosuvastatina (Crestor®). No añadas información adicional.

Conversation starters

Hola! Te voy a enviar una oferta para que me crees un excel con ella

Knowledge

If you upload files under Knowledge, conversations with your GPT may include file contents. Files can be downloaded when Code Interpreter is enabled

Upload files

Capabilities

- Web Browsing
- DALL-E Image Generation
- Code Interpreter

Gestión de ofertas

Objetivo: Como asistente del jefe de Servicio de Farmacia Hospitalaria, tu principal función es analizar las ofertas y propuestas de empresas farmacéuticas. Para llevar a cabo esta tarea, te proveeré documentos en formatos PDF, Word o Excel., deberás compilar esta información en un archivo Excel utilizando los campos especificados a continuación:

- Medicamento: Incluye el nombre del principio activo. Omite cualquier información adicional.
- Laboratorio: Indica el nombre del laboratorio farmacéutico, posteriormente te digo como obtenerlo.
- CN: Introduce el Código Nacional del Medicamento, que es un número de 6 dígitos. En ocasiones, el código puede aparecer como seis dígitos seguidos de un punto y otro dígito; solo incluye los primeros seis dígitos.
- Precio: Lista el precio por unidad, incluyendo el IVA (PVP), en formato numérico. Utiliza la coma (,) como separador decimal y el punto (.) como separador de miles, siguiendo la práctica estándar en España, por ejemplo, 12,00€ son doce euros.

Extrae solo los primeros seis dígitos para el campo CN.

Asegúrate de que los precios reflejen el coste final por unidad después de cualquier descuento.

Avísame si hay condiciones que afecten el precio, como descuentos por compras de más de 100 unidades.

Representa los precios de manera precisa, por ejemplo, 14,00€ o 14.00 indica catorce euros, no mil cuatrocientos.

Si encuentras discrepancias o tienes preguntas, por favor notifícame para aclaración.

Voy a subir un excel llamado "basedatos", allí hay una columna llamada "ns1:cod_nacion" y otra "unidosis", quiero que cuando te pida que analices las ofertas, uses este excel para relacionar CN con ns1:cod_nacion, y relacionar si los medicamentos de las ofertas vienen en formato unidosis "0" es que no, y "SI" y "SIPEX" que sí. también crearás otra columna a la derecha de medicamento que se llame "Presentación", esto lo podrás relacionar a partir del CN en la basedatos, es la columna llamada "dcp

Ademas te preguntare si vienen en unidosis, ten en cuenta que esto es así si en la columna unidosis aparece "SI", o "SIPEX".

**Gestión
de
ofertas**

chat.openai.com/g/g-q/RqwXUP5-ofertas-fh

Banco Santander EVO Banco MIMIC IV Word Reference MICROMEDEX Farmacia Hospitalaria Feed | LinkedIn Hootsuite Journal / Author Na... Machine Learning FH Recetas Dominos

Ofertas_FH

Ofertas_FH

By Iván Maray Mateos

<https://chat.openai.com/g/g-q/RqwXUP5-ofertas-fh>

Hola! Te voy a enviar una oferta para que me crees un...

Message Ofertas_FH...

Gestión de ofertas

You

Hola! Te voy a enviar una oferta para que me crees un excel con ella



Ofertas_FH

¡Entendido! Por favor, envíame el documento de la oferta y procederé a extraer la información necesaria para crear el archivo Excel según tus indicaciones.

You



Oferta HUCA Dic 23 SIN CONFIRMAR.p...
PDF

Ofertas_FH

Searching my knowledge



Gestión de ofertas

SESPA 2024

PEDIDO MÍNIMO 150€

EN FONDO AMARILLO BAJAN DE PRECIO

EN FONDO NARANJA SUBEN DE PRECIO

EN AZUL PRODUCTOS EN ACUERDO MARCO

EN ROJO ÚLTIMOS LANZAMIENTOS

ESTA OFERTA ENTRA EN VIGOR EL 01/01/2024

PRINCIPIO ACTIVO	CÓDIGO NACIONAL	UNIDOSIS	TIPO ENVASE	CAJAS EMBALAJE	ESPECIALIDAD	P.V.L . EUROS E.C.	DTO. (%)	IVA 4%	PRECIO E.C. IVA I.	UDS. POR E.C.	PRECIO UNIDAD IVA I.
ABIRATERONA	758030.0	SÍ	E.U.	48	ABIRATERONA 500mg 60 comprimidos recubiertos con película EFG			4 %		60	
ACETILCISTEINA	656242.0	SÍ	E.U.	54	NORMOFLUDIL 200mg granulado para solución oral 30 sobres EFG			4 %		30	
ACETILCISTEINA	730833.1	SÍ	E.U.	60	ACETILCISTEINA 600mg 20 comprimidos dispersables EFG			4 %		20	
ACICLOVIR	729053.7	NO	E.U.	50	ACICLOVIR 200mg 25 comprimidos EFG			4 %		25	
ACICLOVIR	729095.7	NO	E.U.	40	ACICLOVIR 800mg 35 comprimidos EFG			4 %		35	
ACICLOVIR	658914.4	SÍ	E.U.	100	ACICLOVIR 50mg/g crema 2g EFG			4 %		1	
ACICLOVIR	729103.9	SÍ	E.U.	50	ACICLOVIR 50mg/g crema 15g EFG			4 %		1	
ALOPURINOL	616789.2	SÍ	E.C.	8	ALOPURINOL 100mg 500 comprimidos EFG			4 %		500	
ALOPURINOL	616797.7	SÍ	E.C.	8	ALOPURINOL 300mg 500 comprimidos EFG			4 %		500	
ALPRAZOLAM	617662.7	SÍ	E.C.	8	ALPRAZOLAM 0,25mg 500 comprimidos EFG			4 %		500	
ALPRAZOLAM	617613.9	SÍ	E.C.	8	ALPRAZOLAM 0,5mg 500 comprimidos EFG			4 %		500	
ALPRAZOLAM	617696.2	SÍ	E.C.	8	ALPRAZOLAM 1mg 500 comprimidos EFG			4 %		500	
ALPRAZOLAM	617803.4	SÍ	E.C.	6	ALPRAZOLAM 2mg 500 comprimidos EFG			4 %		500	
AMBROXOL	872390.4	SÍ	E.U.	20	AMBROXOL 3 mg/ml Solución oral EFG 200 ml EFG			4 %		1	
AMIKACINA	625327.4	SÍ	E.C.	8	AMIKACINA 500mg/2ml solución inyectable 50 viales EFG			4 %		50	
AMLODIPINO	602371.6	SÍ	E.C.	8	AMLODIPINO 5mg 500 comprimidos EFG			4 %		500	

Gestión de ofertas

Medicamento	CN	Unidosis en Oferta	Presentación	Laboratorio	PVP IVA Unidad
ABIRATERONA	758030	SIPEX	Abiraterona 500 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ACETILCISTEINA	656242		0 Acetilcisteína 200 mg solución/suspensión	LABORATORIOS	0
ACETILCISTEINA	730833	SI	Acetilcisteína 600 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ACICLOVIR	729053		0 Aciclovir 200 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ACICLOVIR	729095		0 Aciclovir 800 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ACICLOVIR	658914		0 Aciclovir 50 mg/g crema	LABORATORIOS	0
ACICLOVIR	729103		0 Aciclovir 50 mg/g crema	LABORATORIOS	0
ALOPURINOL	616789	SI	Alopurinol 100 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ALOPURINOL	616797	SI	Alopurinol 300 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ALPRAZOLAM	617662	SI	Alprazolam 0,25 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ALPRAZOLAM	617613	SI	Alprazolam 0,5 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ALPRAZOLAM	617696	SI	Alprazolam 1 mg comprimido	LABORATORIOS	0
ALPRAZOLAM	617803	SI	Alprazolam 2 mg comprimido	LABORATORIOS	0
AMBROXOL	872390		0 Ambroxol 3 mg/ml solución/suspensión	LABORATORIOS	0
AMIKACINA	625327		0 Amikacina 500 mg inyectable 2 ml	LABORATORIOS	0
AMLODIPINO	602371	SI	Amlodipino 5 mg comprimido	LABORATORIOS	0
AMLODIPINO	602372	SI	Amlodipino 10 mg comprimido	LABORATORIOS	0
AMOXICILINA	611616		0 Amoxicilina 250 mg solución/suspensión	LABORATORIOS	0
AMOXICILINA	694734		0 Amoxicilina 500 mg solución/suspensión	LABORATORIOS	0
AMOXICILINA	694733		0 Amoxicilina 1.000 mg solución/suspensión	LABORATORIOS	0
AMOXICILINA	603472	SI	Amoxicilina 500 mg cápsula	LABORATORIOS	0
AMOXICILINA	605675	SI	Amoxicilina 500 mg comprimido	LABORATORIOS	0



Gestión
de
ofertas

Ofertas_2 ▾



Ofertas_2

By Iván Maray Mateos ⚙

Dame un listado con los medicamentos que vienen e...

De cada presentación dime el medicamento más bar...

De cada presentación si el medicamento mas barato ...

🗨 Message Ofertas_2...



Gestión de ofertas



Ofertas_2

Aquí tienes un listado de los medicamentos en formato unidosis más baratos, ordenados de menor a mayor precio:

1. **Alprazolam 0,25 mg comprimido:** [redacted] € por unidad, de LABORATORIOS [redacted]
2. **Paracetamol 500 mg comprimido:** [redacted] € por unidad, de LABORATORIOS [redacted]
3. **Diazepam 5 mg comprimido:** [redacted] € por unidad, de LABORATORIOS [redacted]
4. **Paracetamol 650 mg comprimido:** [redacted] € por unidad, de LABORATORIOS [redacted]
5. **Bromazepam 1,5 mg cápsula:** [redacted] € por unidad, de LABORATORIOS [redacted]

¿Te gustaría que guarde este listado en un archivo Excel o tienes otra solicitud? Aquí tienes nuevamente las opciones para continuar:

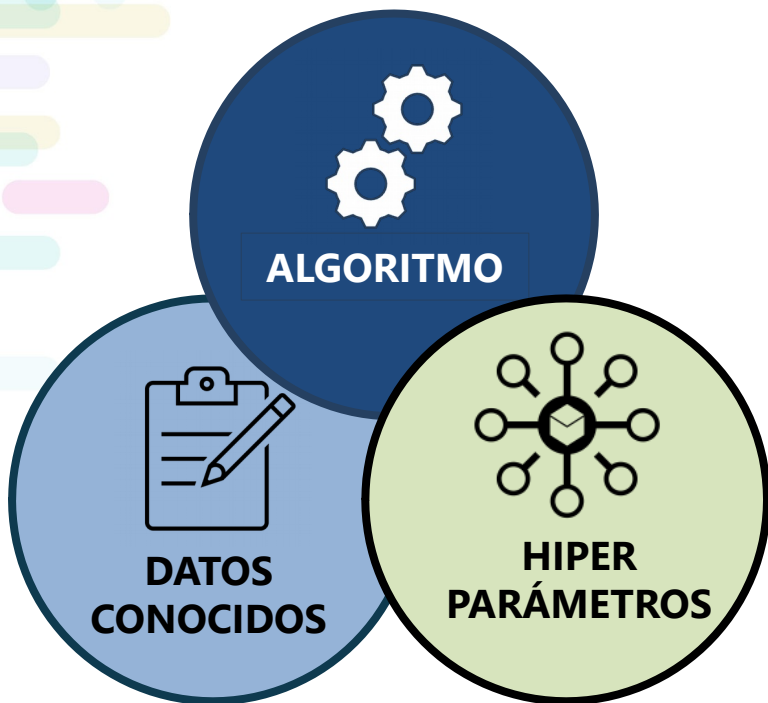
1. **Guardar el listado en Excel.**
2. **Más detalles sobre alguna presentación específica.**
3. **Comparación de precios unidosis vs. no unidosis.** [↔]

Casos de Uso en IA

**MACHINE
LEARNING**



¿Qué es el machine learning?



Aplicaciones del ML en FH

Predicción de efectividad/mortalidad/toxicidad

[nature](#) > [nature communications](#) > [articles](#) > [article](#)

Article | [Open access](#) | Published: 28 June 2022

Network-based machine learning approach to predict immunotherapy response in cancer patients

[JungHo Kong](#), [Doyeon Ha](#), [Juhun Lee](#), [Inhae Kim](#), [Minhyuk Park](#), [Sin-Hyeog Im](#), [Kunwoo Shin](#) & [Sanguk](#)

[Kim](#) 

[Nature Communications](#) **13**, Article number: 3703 (2022) | [Cite this article](#)

26k Accesses | 54 Citations | 109 Altmetric | [Metrics](#)

> [J Infect Chemother](#). 2022 Sep;28(9):1249-1254. doi: 10.1016/j.jiac.2022.05.004. Epub 2022 May 14.

Linezolid induced thrombocytopenia in critically ill patients: Risk factors and development of a machine learning-based prediction model

[Ivan Maray](#)¹, [Adrián Rodríguez-Ferreras](#)², [Cristina Álvarez-Asteiza](#)³, [Miguel Alaguero-Calero](#)³, [Pablo Valledor](#)⁴, [Javier Fernández](#)⁵

> [PLoS One](#) (IF: [3.24](#); [Q2](#)). 2021 Apr 16;16(4):e0250370. doi: 10.1371/journal.pone.0250370. eCollection 2021.

Predicting breast cancer 5-year survival using machine learning: A systematic review

[Jiaxin Li](#)¹, [Zijun Zhou](#)², [Jianyu Dong](#)¹, [Ying Fu](#)¹, [Yuan Li](#)¹, [Ze Luan](#)¹, [Xin Peng](#)¹

> [J Oncol Pharm Pract](#). 2023 Sep 6;10781552231200795. doi: 10.1177/10781552231200795. Online ahead of print.

Dose reduction and toxicity of lenalidomide-dexamethasone in multiple myeloma: A machine-learning prediction model

[Iván Maray](#)¹, [Cristina Álvarez-Asteiza](#)¹, [Clara Luz Fernández-Laguna](#)¹, [Lola Macía-Rivas](#)¹, [Mónica Carbajales-Álvarez](#)¹, [Ana Lozano-Blazquez](#)¹

[Clinical Trial](#) > [PLoS One](#) (IF: [3.24](#); [Q2](#)). 2021 Jan 19;16(1):e0245157.

doi: 10.1371/journal.pone.0245157. eCollection 2021.

A comparison of machine learning models versus clinical evaluation for mortality prediction in patients with sepsis

[William P T M van Doorn](#)^{1 2}, [Patricia M Stassen](#)^{3 4}, [Hella F Borggreve](#)³, [Maaïke J Schalkwijk](#)³, [Judith Stoffers](#)³, [Otto Bekers](#)^{1 2}, [Steven J R Meex](#)^{1 2}

Affiliations + expand

PMID: 33465096 PMID: PMC7815112 DOI: 10.1371/journal.pone.0245157

Drag and drop

Software integral y basado en componentes para aprendizaje automático y minería de datos desarrollado por el Laboratorio de Bioinformática (Facultad de Informática y Ciencias de la Información, Universidad de Liubliana, Eslovenia), junto con la comunidad de código abierto.

Orange es software libre.

Orange Data Mining



Casos de Uso en IA

**MACHINE
LEARNING**



CASO 2. AVANZADO

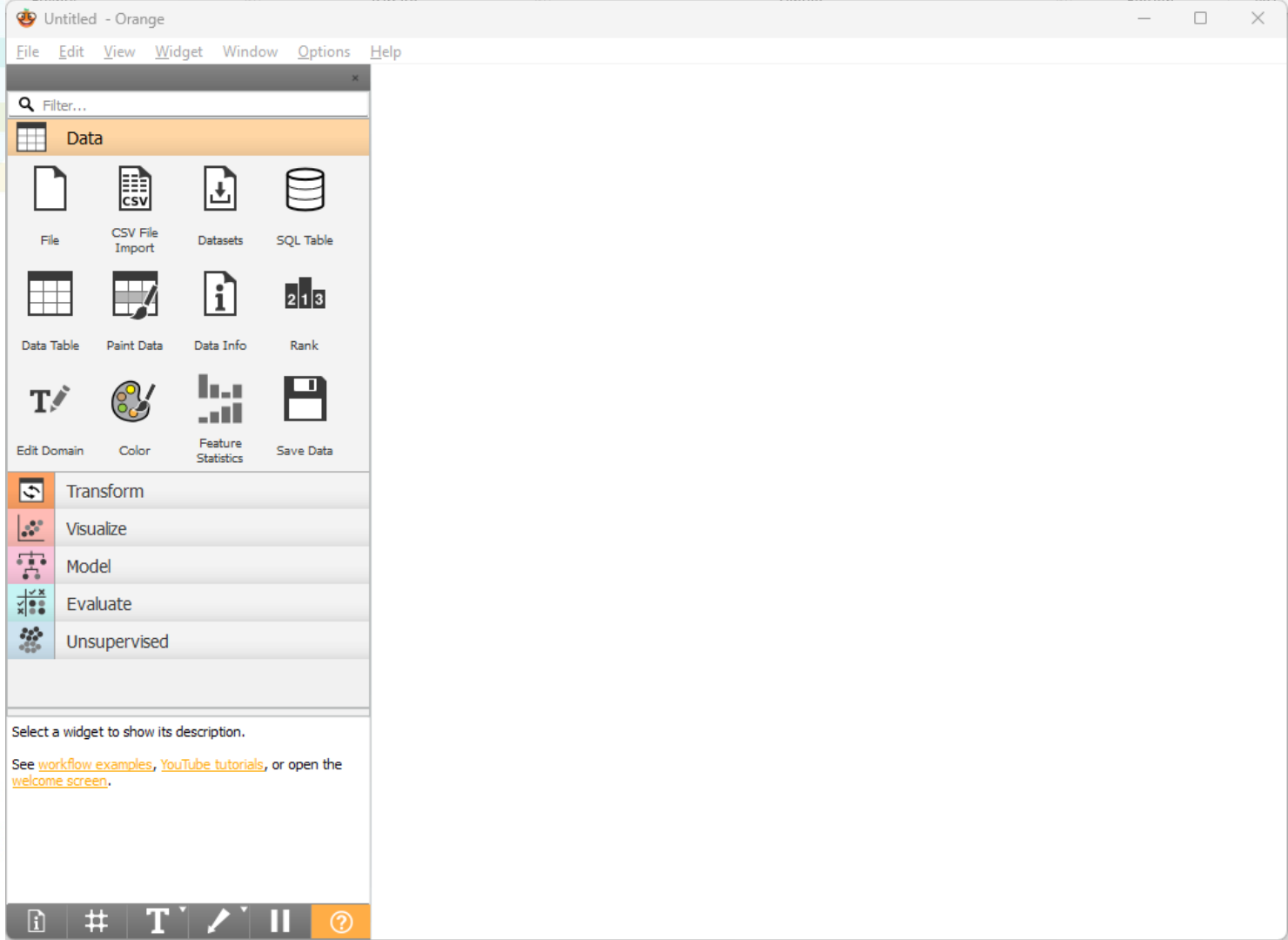
**Modelo ML de
predicción de niveles
tóxicos o
subterapéuticos de
voriconazol**

Casos prácticos de aplicación

Modelo Predictivo usando Machine Learning



Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



Untitled - Orange

File Edit View Widget Window Options Help

Filter...

Data

- File
- CSV File Import
- Datasets
- SQL Table
- Data Table
- Paint Data
- Data Info
- Rank
- Edit Domain
- Color
- Feature Statistics
- Save Data

Transform

Visualize

Model

Evaluate

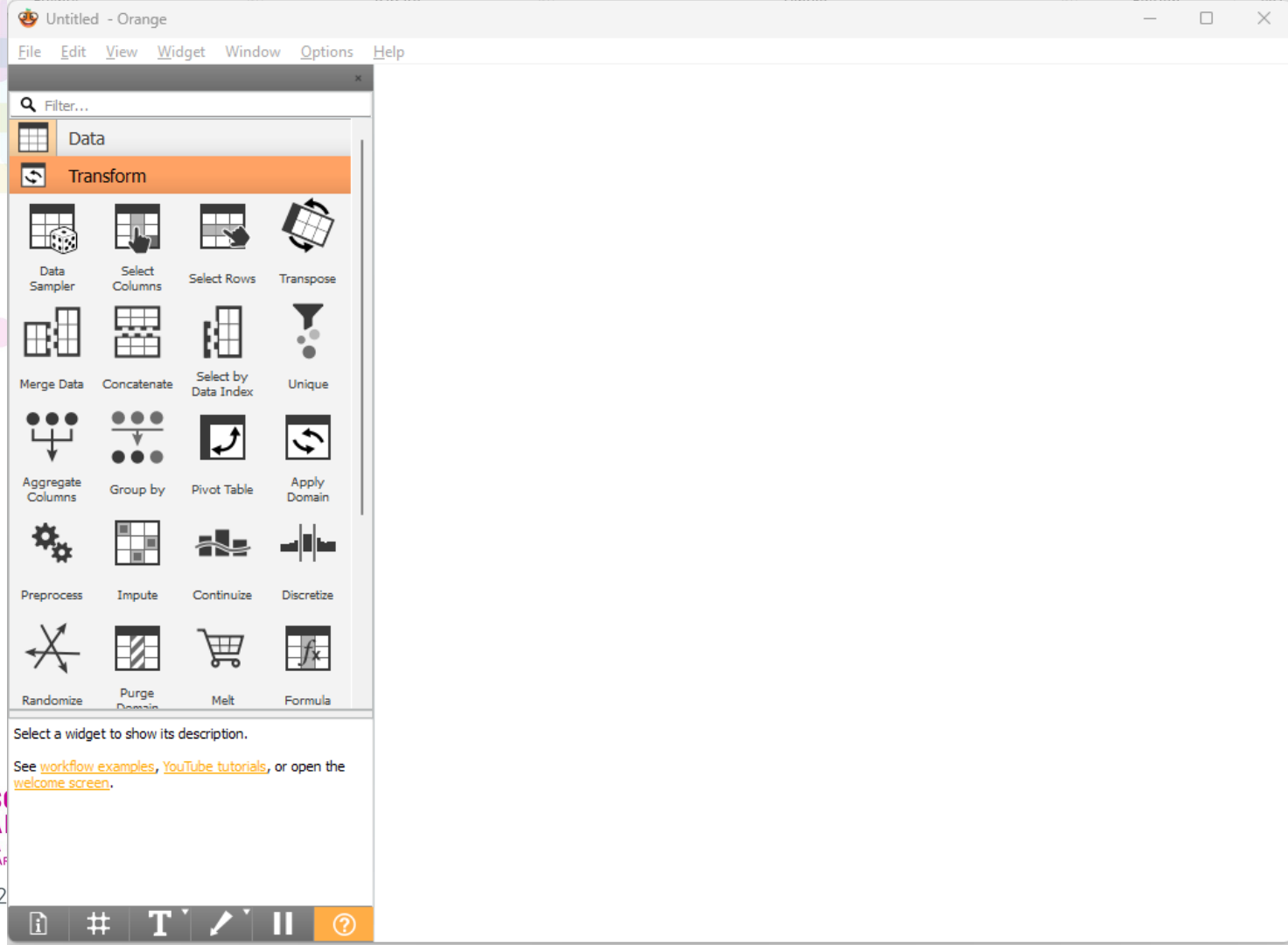
Unsupervised

Select a widget to show its description.

See [workflow examples](#), [YouTube tutorials](#), or open the [welcome screen](#).

Info Hash Text Edit Pause Help

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



Untitled - Orange

File Edit View Widget Window Options Help

Filter...

Data

Transform

Data Sampler Select Columns Select Rows Transpose

Merge Data Concatenate Select by Data Index Unique

Aggregate Columns Group by Pivot Table Apply Domain

Preprocess Impute Continuize Discretize

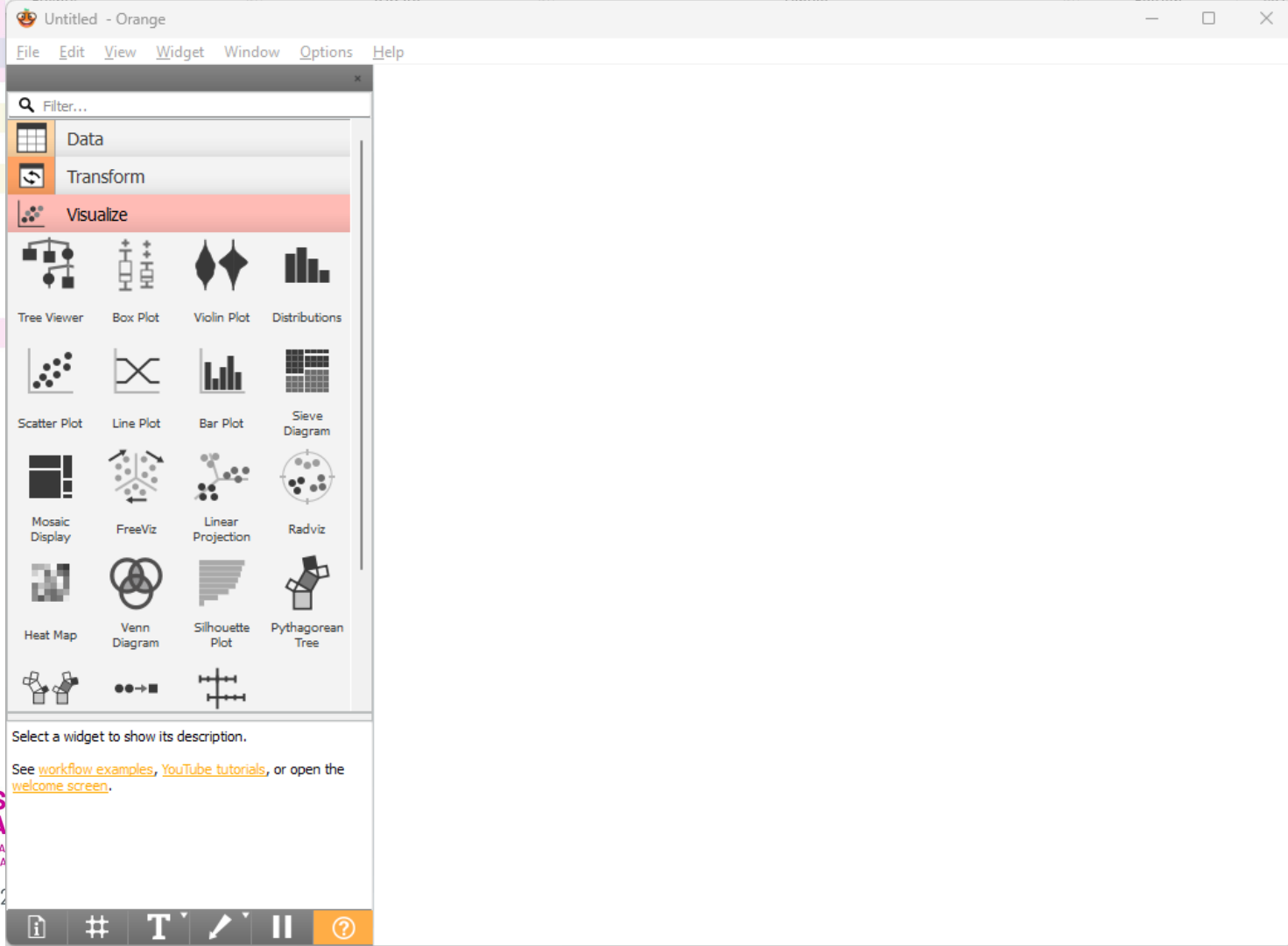
Randomize Purge Duplicate Melt Formula

Select a widget to show its description.

See [workflow examples](#), [YouTube tutorials](#), or open the [welcome screen](#).

i # T ↕ || ?

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



Untitled - Orange

File Edit View Widget Window Options Help

Filter...

Data

Transform

Visualize

Tree Viewer Box Plot Violin Plot Distributions

Scatter Plot Line Plot Bar Plot Sieve Diagram

Mosaic Display FreeViz Linear Projection Radviz

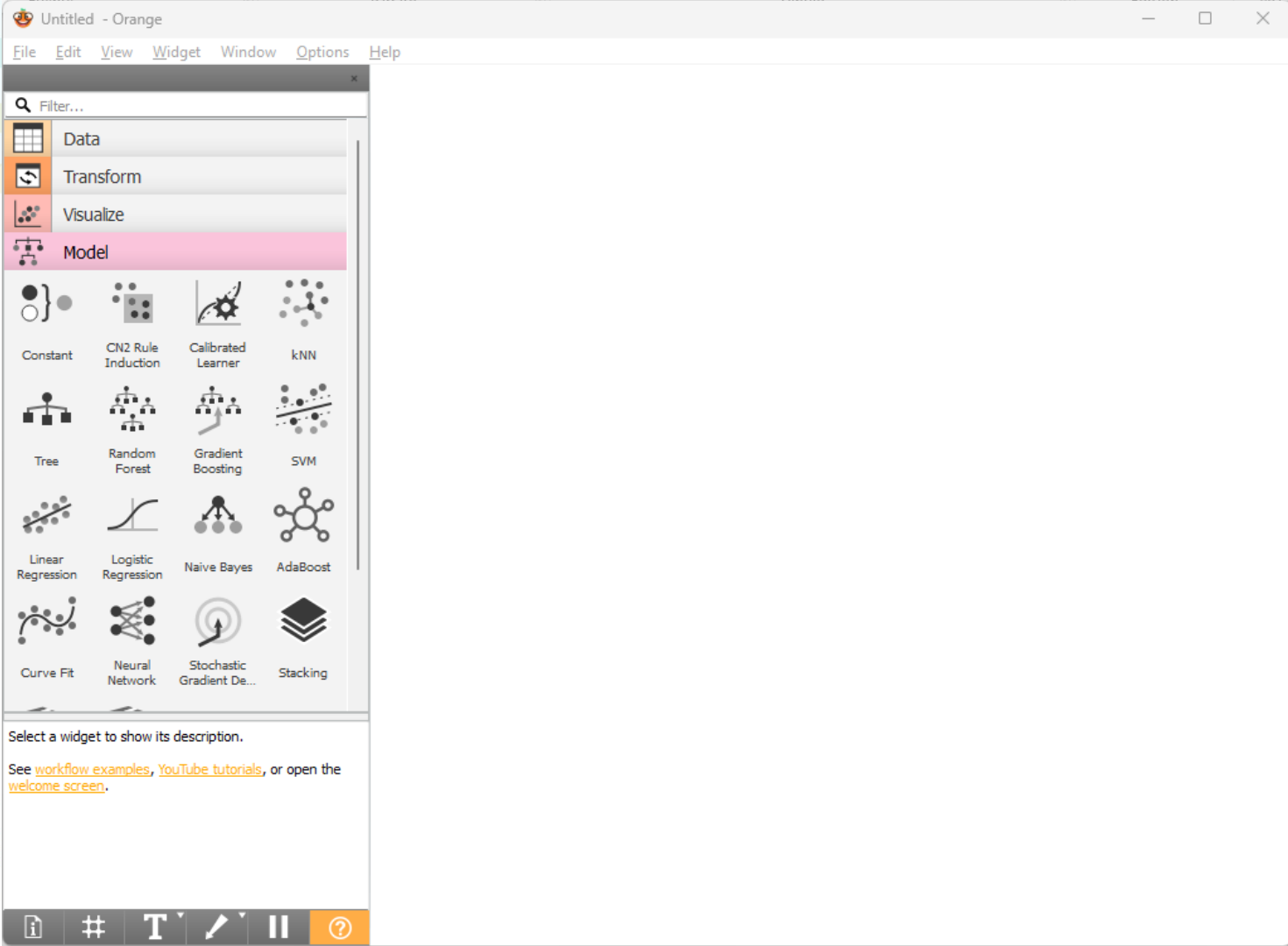
Heat Map Venn Diagram Silhouette Plot Pythagorean Tree

Select a widget to show its description.

See [workflow examples](#), [YouTube tutorials](#), or open the [welcome screen](#).

?

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



Untitled - Orange

File Edit View Widget Window Options Help

















Filter...

Data

Transform

Visualize

Model

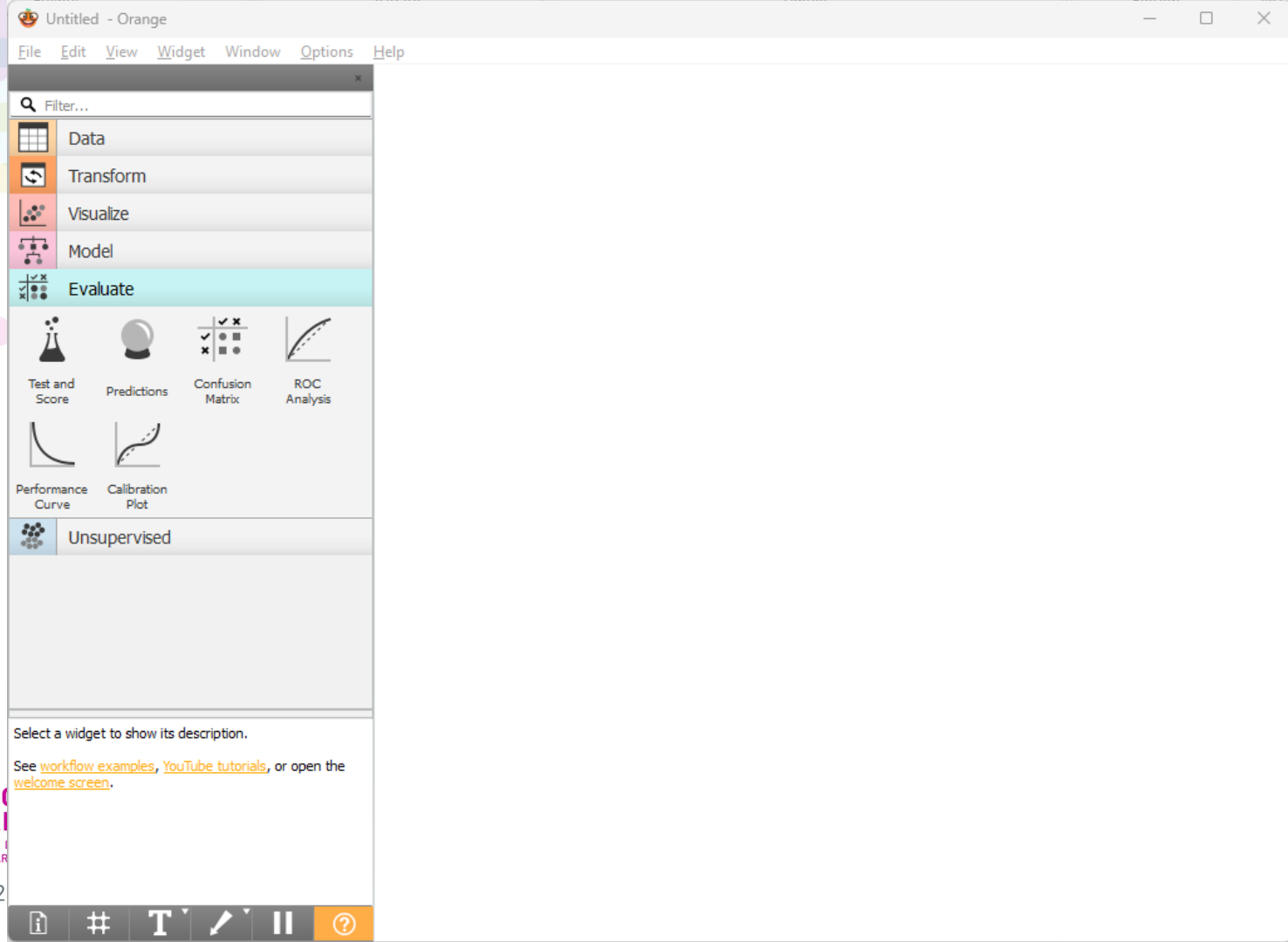
 Constant	 CN2 Rule Induction	 Calibrated Learner	 kNN
 Tree	 Random Forest	 Gradient Boosting	 SVM
 Linear Regression	 Logistic Regression	 Naive Bayes	 AdaBoost
 Curve Fit	 Neural Network	 Stochastic Gradient De...	 Stacking

Select a widget to show its description.

See [workflow examples](#), [YouTube tutorials](#), or open the [welcome screen](#).

Info # T Edit Pause Help

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



Untitled - Orange

File Edit View Widget Window Options Help

Filter...

- Data
- Transform
- Visualize
- Model
- Evaluate

Test and Score Predictions Confusion Matrix ROC Analysis

Performance Curve Calibration Plot

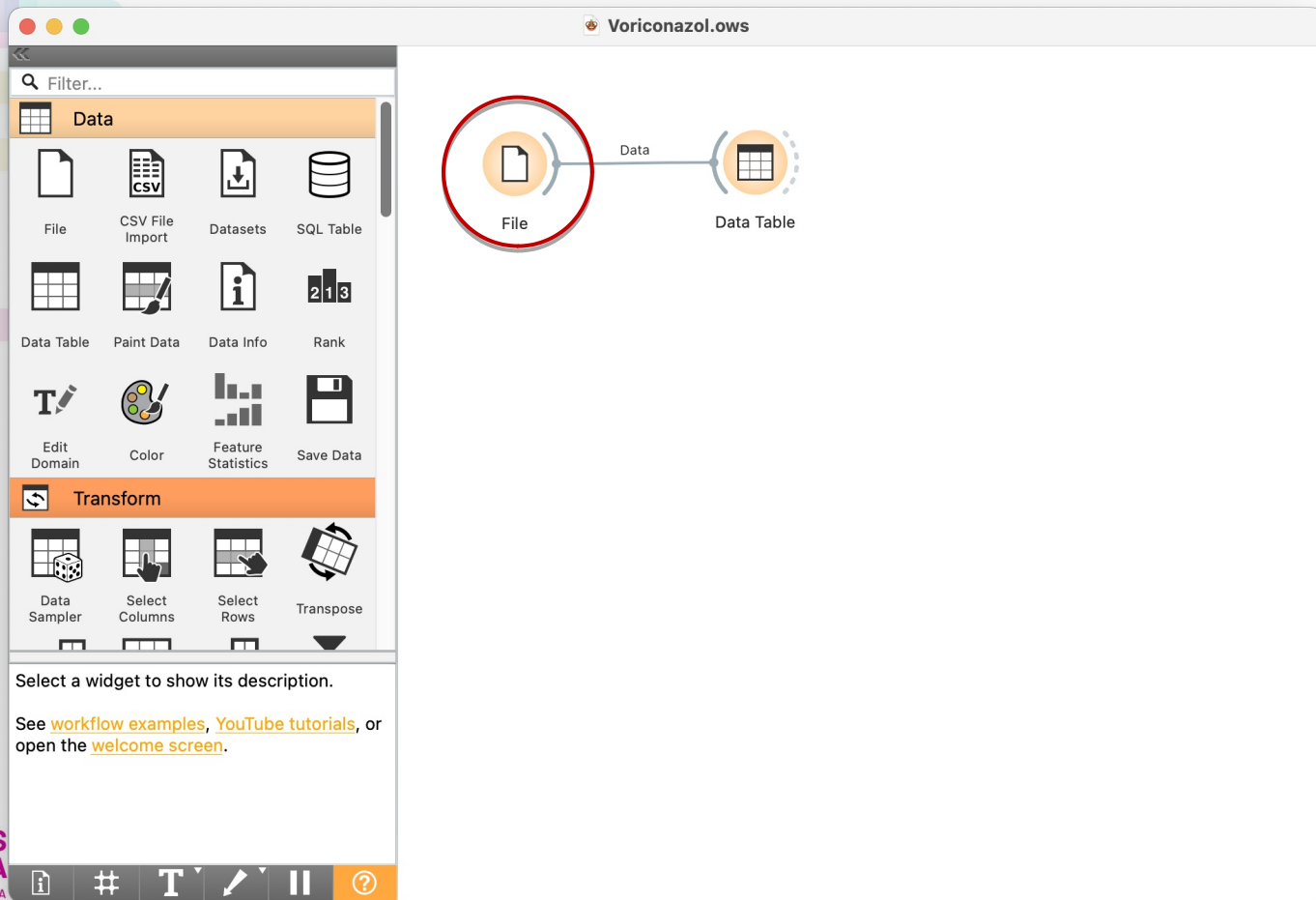
Unsupervised

Select a widget to show its description.

See [workflow examples](#), [YouTube tutorials](#), or open the [welcome screen](#).

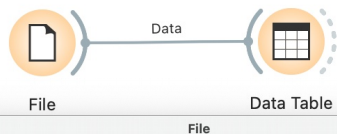
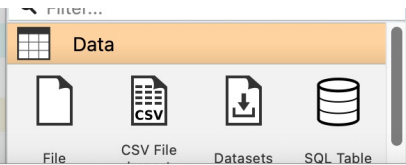
Information, Home, Text, Erase, Pause, Help icons

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



The screenshot shows the Orange3 software interface. On the left is a widget palette with two main sections: "Data" and "Transform". The "Data" section includes widgets like File, CSV File Import, Datasets, SQL Table, Data Table, Paint Data, Data Info, Rank, Edit Domain, Color, Feature Statistics, and Save Data. The "Transform" section includes Data Sampler, Select Columns, Select Rows, and Transpose. Below the palette is a text box with instructions: "Select a widget to show its description. See [workflow examples](#), [YouTube tutorials](#), or open the [welcome screen](#)." On the right is the workflow canvas, which contains a "File" widget (circled in red) connected to a "Data Table" widget via a "Data" link. The window title is "Voriconazol.ows".

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



File

Source

File: Voriconazol/VoriconazoL_CATEDRA_IA.xlsx

URL:

File Type

Automatically detect type

Info

128 instances
33 features (10.0% missing values)
Data has no target variable.
0 meta attributes

Columns (Double click to edit)

	Name	Type	Role	Values
1	NHC	N numeric	skip	
2	NIVEL_VORI	N numeric	feature	
3	resultado	C categori...	target	infraterapéutico, terapéutico, toxicidad
4	SEXO	C categorical	feature	H, M
5	Edad	N numeric	feature	
6	ALAT	N numeric	feature	
7	ALBUMINA	N numeric	feature	
8	ASAT	N numeric	feature	
9	Bilirrubina	C categorical	feature	1-5, 5-10, < 1,0, >10
10	FG	C categorical	feature	15-60, 60-90, <15, >90
11	Fosfatasa	N numeric	feature	
12	GGT	N numeric	feature	

Reset

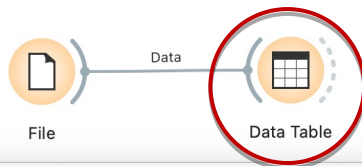
Apply

Browse documentation datasets

128

Data

File CSV File Import Datasets SQL Table



Modelo Predictivo usando Machine Learning

Data Table

Info

128 instances
31 features (10.7 % missing data)
Target with 3 values
No meta attributes.

Variables

- Show variable labels (if present)
- Visualize numeric values
- Color by instance classes

Selection

- Select full rows

	resultado	NIVEL_VORI	SEXO	Edad	ALAT	ALBUMINA	ASAT	Bilirrubina	FG	Fosfatasa	GGT	Hb
1	infraterapéut...	0.70	M	51.5752	?	38	?	?	15-60	?	?	?
2	infraterapéut...	0.51	M	65.2516	29	?	?	?	60-90	101	?	?
3	infraterapéut...	0.91	M	61.4549	23	?	27	< 1,0	60-90	80	40	?
4	infraterapéut...	0.88	H	68.8152	64	27	46	< 1,0	60-90	245	469	?
5	infraterapéut...	0.01	M	37.204	24	?	28	< 1,0	>90	175	65	?
6	infraterapéut...	0.67	M	71.7536	38	29	31	< 1,0	>90	79	72	?
7	infraterapéut...	0.65	H	69.1986	15	26	16	< 1,0	>90	159	141	?
8	infraterapéut...	0.61	M	57.7519	40	25	63	< 1,0	>90	1038	377	?
9	infraterapéut...	0.81	H	69.0597	30	26	46	< 1,0	>90	529	477	?
10	infraterapéut...	0.61	M	54.4811	70	33	52	< 1,0	>90	699	394	?
11	infraterapéut...	0.37	M	55.0511	11	45	?	< 1,0	>90	65	?	?
12	infraterapéut...	0.10	H	57.0478	20	29	?	?	>90	?	?	?
13	infraterapéut...	0.32	H	16.8397	97	?	36	< 1,0	?	122	95	?
14	infraterapéut...	0.14	H	72.4838	59	22	31	< 1,0	?	109	147	?
15	infraterapéut...	0.10	H	57.8095	?	?	?	?	?	?	?	?
16	terapéutico	4.66	H	63.3111	9	30	15	< 1,0	<15	69	31	?
17	terapéutico	4.21	H	60.9358	22	26	28	< 1,0	15-60	77	43	?
18	terapéutico	3.30	H	86.7277	38	24	36	< 1,0	15-60	98	130	?
19	terapéutico	4.96	H	91.5956	39	34	31	< 1,0	15-60	92	49	?
20	terapéutico	4.76	H	69.9633	29	27	22	1-5	15-60	91	33	?
21	terapéutico	2.81	H	36.8695	5	39	8	< 1,0	15-60	156	13	?
22	terapéutico	4.43	H	83.8208	15	30	21	< 1,0	15-60	206	228	?
23	terapéutico	4.35	H	80.5109	9	32	18	?	15-60	110	?	?
24	terapéutico	2.28	H	68.2263	25	35	?	< 1,0	15-60	119	?	?
25	terapéutico	3.21	H	78.7608	43	38	67	< 1,0	15-60	173	139	?
26	terapéutico	2.57	H	36.1245	50	41	29	< 1,0	15-60	136	143	?
27	terapéutico	2.56	H	68.2045	5	40	10	< 1,0	15-60	89	43	?
28	terapéutico	2.17	M	54.2831	48	22	21	< 1,0	15-60	134	204	?
29	terapéutico	2.64	M	65.1546	12	?	?	< 1,0	15-60	82	?	?
30	terapéutico	2.30	M	48.7476	?	?	?	?	15-60	?	?	?
31	terapéutico	3.53	M	79.5443	16	32	25	< 1,0	15-60	?	66	?
32	terapéutico	1.24	H	47.944	8	41	13	< 1,0	60-90	89	25	?
33	terapéutico	2.66	H	72.2777	16	46	?	< 1,0	60-90	72	?	?
34	terapéutico	2.49	H	72.3356	12	?	?	< 1,0	60-90	83	?	?
35	terapéutico	4.61	H	71.5026	16	?	?	< 1,0	60-90	140	124	?

Restore Original Order

Send Automatically

128 | 128

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning

Untitled* - Orange

File Edit View Widget Window Options Help

Filter...

Rank

Scoring Methods

- Information Gain
- Information Gain Ratio
- Gini Decrease
- ANOVA
- χ^2
- ReliefF
- FCBF

		#	Info. gain	Gain ratio	Gini
1	N URATO		0.148	0.074	0.027
2	N ASAT		0.111	0.056	0.032
3	N Fosfatasa		0.106	0.053	0.044
4	N ALBUMINA		0.078	0.039	0.023
5	C Cardiopatía (SI/NO)	2	0.071	0.085	0.010
6	C Vía de administración voriconazol	3	0.064	0.050	0.012
7	C Bilirrubina	4	0.063	0.131	0.025
8	N Dosis voriconazol (mg/kg)		0.062	0.031	0.017
9	N ALAT		0.061	0.031	0.017
10	C Forma farmacéutica	3	0.061	0.050	0.011
11	N IMC		0.055	0.027	0.019
12	C Patología respiratoria crónica (SI/NO)	2	0.055	0.056	0.017
13	N Edad		0.054	0.027	0.011
14	C FG	4	0.052	0.033	0.010
15	N PCT		0.050	0.025	0.016
16	N LINFOCITOS		0.044	0.022	0.015
17	N Hb		0.043	0.022	0.010
18	C Dislipemia (SI/NO)	2	0.038	0.041	0.006
19	N NEUTROFILOS		0.038	0.019	0.007
20	N PLAQUETAS		0.037	0.019	0.007
21	N LEUCOCITOS		0.037	0.018	0.012
22	C Hipertensión arterial (SI/NO)	2	0.027	0.027	0.006
23	N LDH		0.023	0.011	0.005
24	N PCR		0.022	0.011	0.004
25	C SEXO	2	0.018	0.020	0.004

Select Attributes

- None
- All
- Manual
- Best ranked: 5

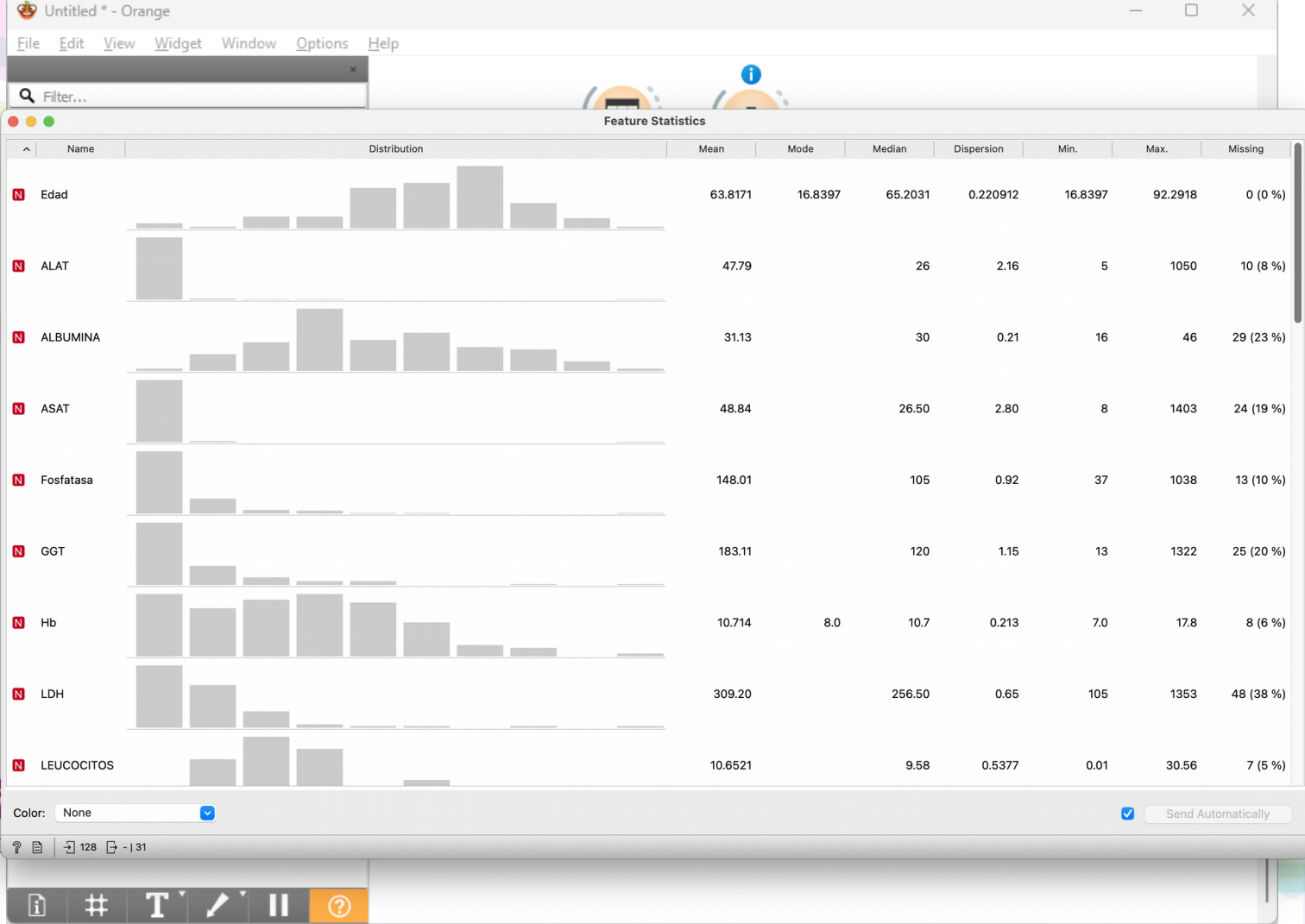
Send Automatically

Missing values will be imputed as needed.

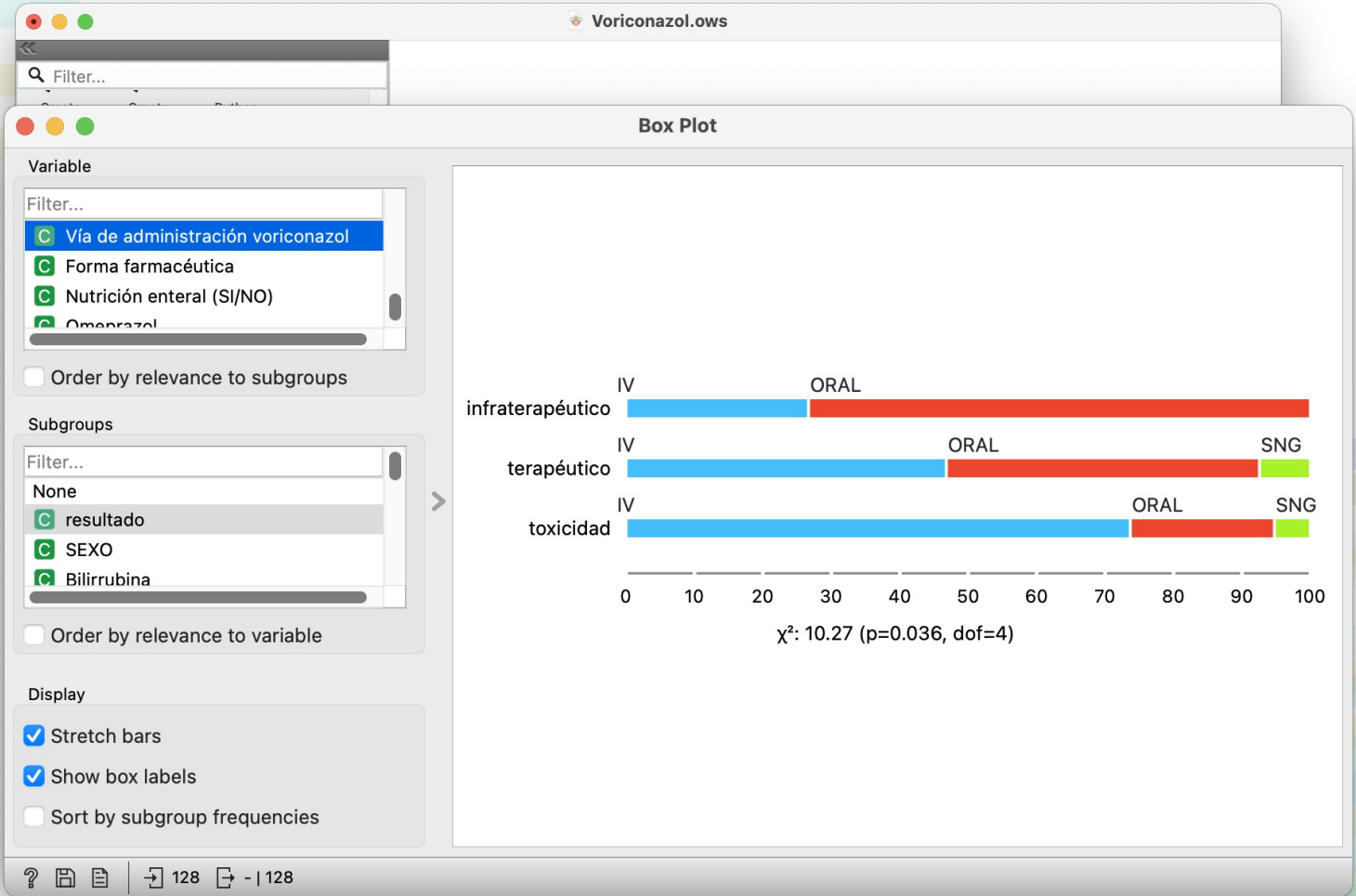
Scoring methods (classification)

1. **Information Gain**: the expected amount of information (reduction of entropy)
2. **Gain Ratio**: a ratio of the information gain and the attribute's intrinsic information, which reduces the bias towards multivalued features that occurs in information gain
3. **Gini**: the inequality among values of a frequency distribution
4. **ANOVA**: the difference between average values of the feature in different classes
5. **Chi2**: dependence between the feature and the class as measured by the chi-square statistic
6. **ReliefF**: the ability of an attribute to distinguish between classes on similar data instances
7. **FCBF (Fast Correlation Based Filter)**: entropy-based measure, which also identifies redundancy due to pairwise correlations between features

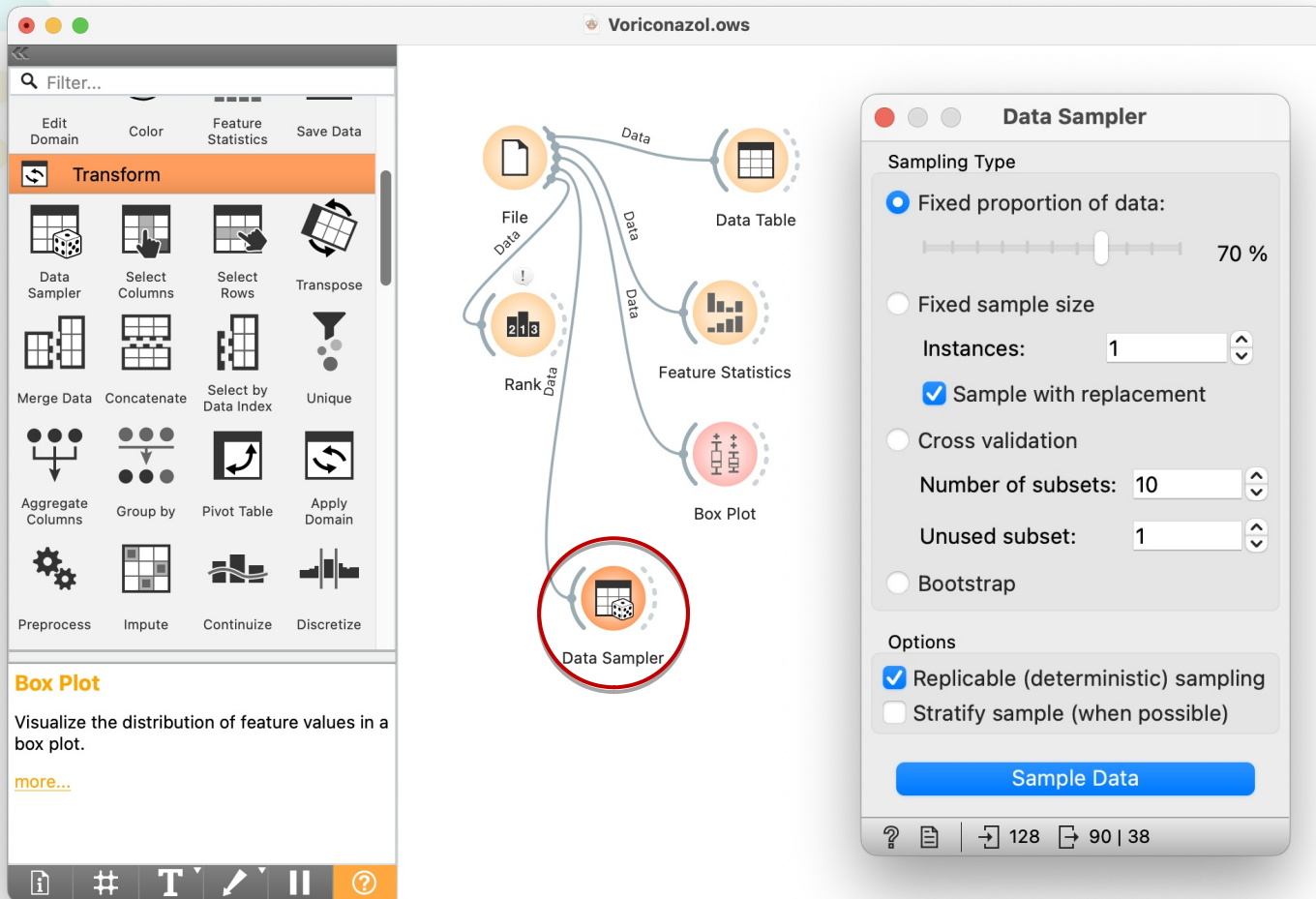
Modelo Predictivo usando Machine Learning



**Modelo
 Predictivo
 usando
 Machine
 Learning**



Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



The screenshot displays the Orange3 data mining software interface. On the left, a widget palette is open to the 'Transform' category, showing various data manipulation tools. In the center, a workflow is visible with several widgets: 'File', 'Rank', 'Data Sampler', 'Data Table', 'Feature Statistics', and 'Box Plot'. The 'Data Sampler' widget is highlighted with a red circle. On the right, the configuration window for the 'Data Sampler' widget is shown, detailing its settings.

Transform

- Data Sampler
- Select Columns
- Select Rows
- Transpose
- Merge Data
- Concatenate
- Select by Data Index
- Unique
- Aggregate Columns
- Group by
- Pivot Table
- Apply Domain
- Preprocess
- Impute
- Continuize
- Discretize

Box Plot

Visualize the distribution of feature values in a box plot.

[more...](#)

Data Sampler

Sampling Type

- Fixed proportion of data: 70 %
- Fixed sample size

Instances: 1

- Sample with replacement
- Cross validation

Number of subsets: 10

Unused subset: 1

- Bootstrap

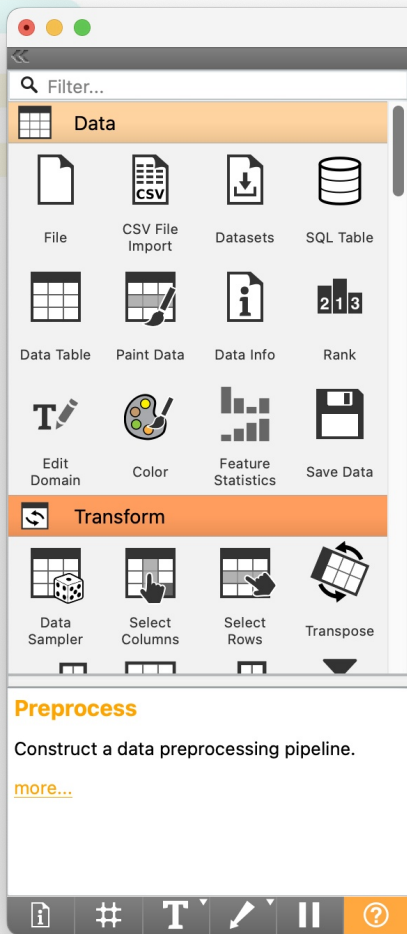
Options

- Replicable (deterministic) sampling
- Stratify sample (when possible)

Sample Data

? | 128 | 90 | 38

Modelo
Predictivo
usando
Machine
Learning



Filter...

Data

- File
- CSV File Import
- Datasets
- SQL Table
- Data Table
- Paint Data
- Data Info
- Rank
- Edit Domain
- Color
- Feature Statistics
- Save Data

Transform

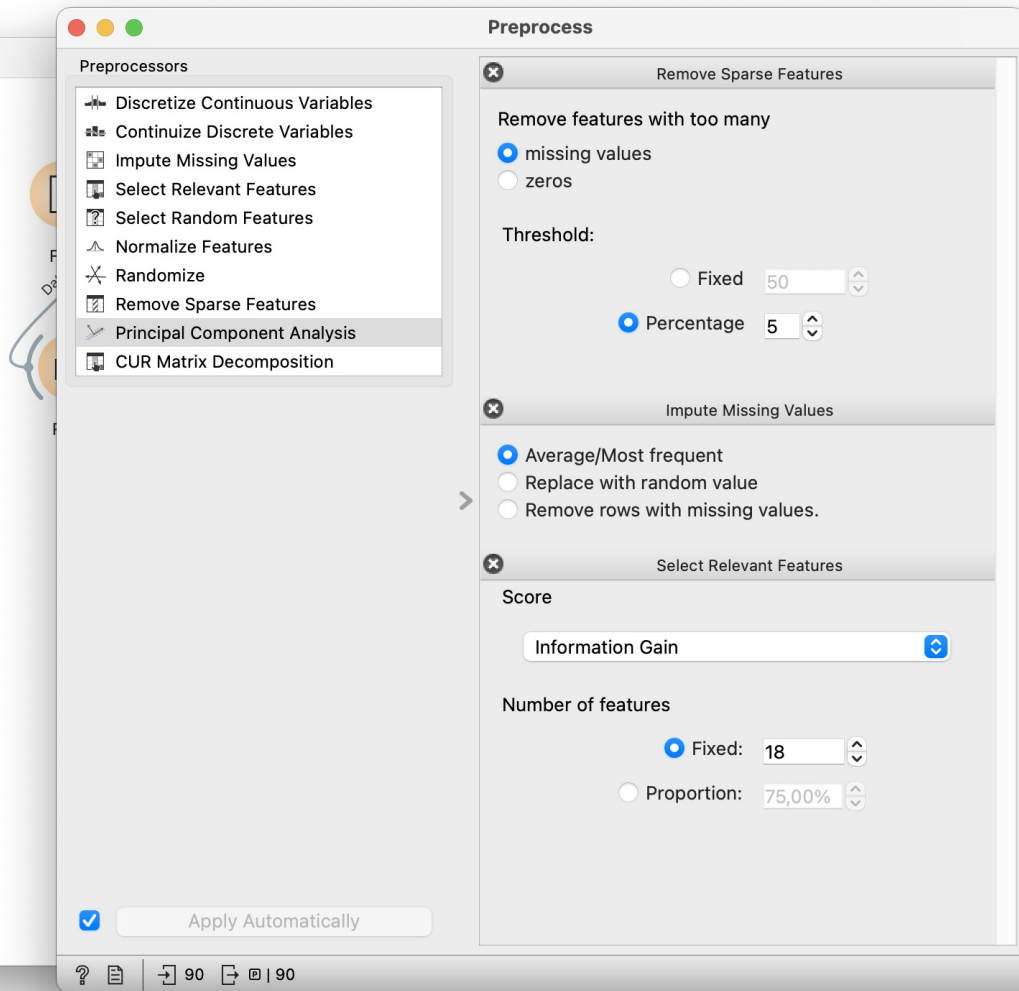
- Data Sampler
- Select Columns
- Select Rows
- Transpose

Preprocess

Construct a data preprocessing pipeline.

[more...](#)

Info, Home, Text, Arrow, Pause, Help icons



Preprocess

Preprocessors

- Discretize Continuous Variables
- Continuize Discrete Variables
- Impute Missing Values
- Select Relevant Features
- Select Random Features
- Normalize Features
- Randomize
- Remove Sparse Features
- Principal Component Analysis
- CUR Matrix Decomposition

Remove Sparse Features

Remove features with too many

- missing values
- zeros

Threshold:

- Fixed: 50
- Percentage: 5

Impute Missing Values

- Average/Most frequent
- Replace with random value
- Remove rows with missing values.

Select Relevant Features

Score

Information Gain

Number of features

- Fixed: 18
- Proportion: 75,00%

Apply Automatically

90 90

Modelo Predictivo usando Machine Learning

Voriconazol.ows

Filter...

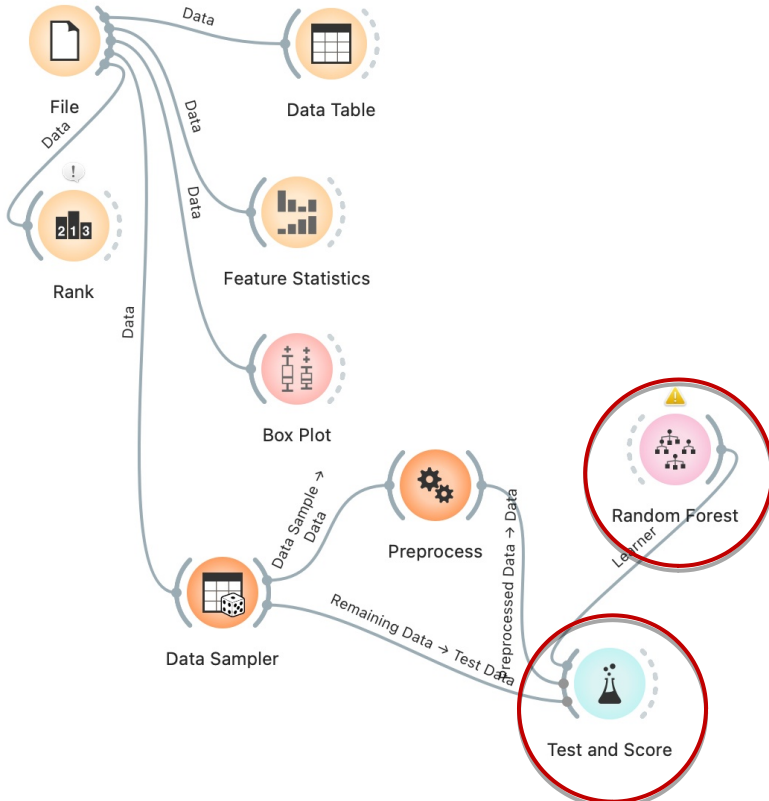
Pythagorean Forest CN2 Rule Viewer Nomogram

Model

Constant	CN2 Rule Induction	Calibrated Learner	kNN
Tree	Random Forest	Gradient Boosting	SVM
Linear Regression	Logistic Regression	Naive Bayes	AdaBoost
Curve Fit	Neural Network	Stochastic Gradient D...	Stacking

Select a widget to show its description.

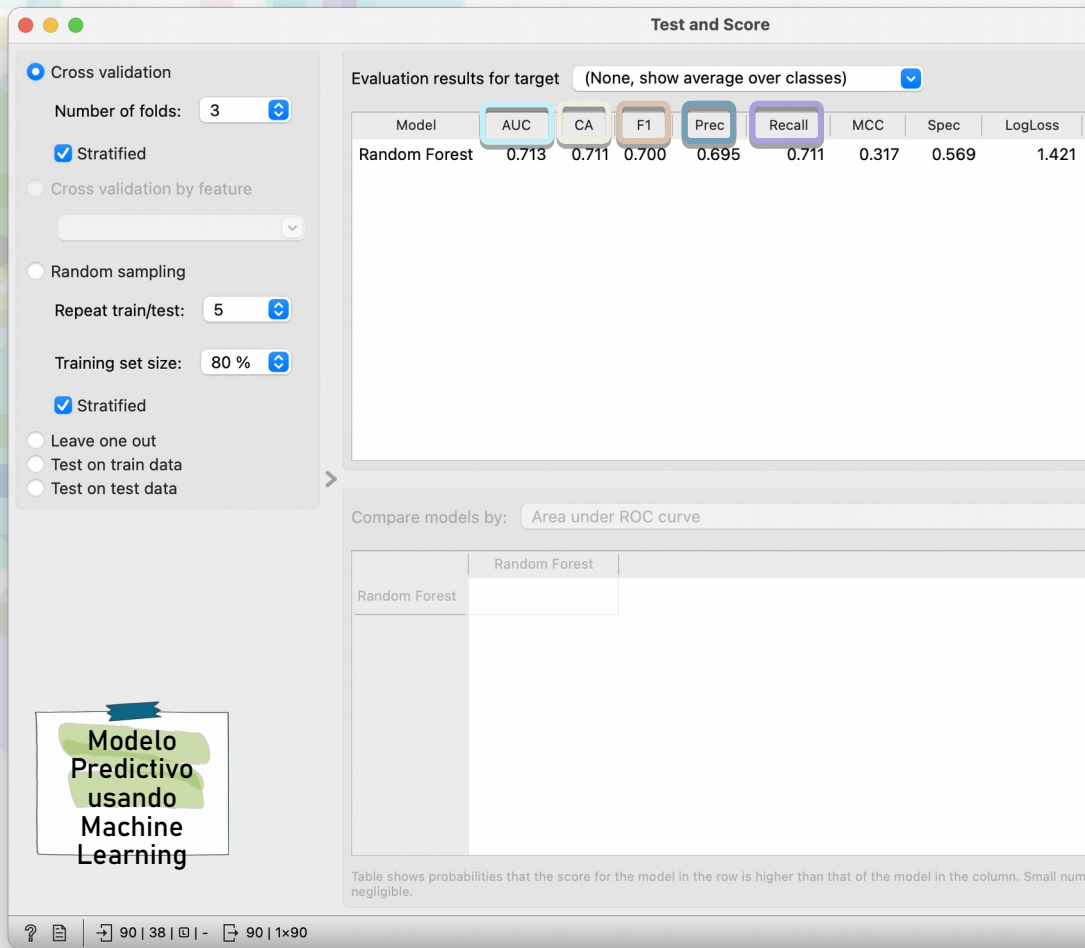
See [workflow examples](#), [YouTube tutorials](#), or open the [welcome screen](#).



```

    graph TD
      File[File] -- Data --> DataSampler[Data Sampler]
      DataSampler -- Data --> Rank[Rank]
      DataSampler -- Data --> DataTable[Data Table]
      DataSampler -- Data --> FeatureStats[Feature Statistics]
      DataSampler -- Data --> BoxPlot[Box Plot]
      DataSampler -- Data --> Preprocess[Preprocess]
      Preprocess -- "Data Sample Data" --> RandomForest[Random Forest Learner]
      Preprocess -- "Remaining Data" --> TestScore[Test and Score]
      RandomForest -- "reprocessed Data" --> TestScore
  
```

The diagram illustrates a machine learning workflow. It starts with a 'File' widget that feeds into a 'Data Sampler'. From the 'Data Sampler', data is distributed to several analysis widgets: 'Rank', 'Data Table', 'Feature Statistics', 'Box Plot', and 'Preprocess'. The 'Preprocess' widget then splits the data into 'Data Sample Data' and 'Remaining Data'. The 'Data Sample Data' is used by the 'Random Forest Learner' widget, which is highlighted with a red circle. The 'Remaining Data' is used by the 'Test and Score' widget, also highlighted with a red circle. A feedback loop labeled 'reprocessed Data' connects the 'Random Forest Learner' back to the 'Test and Score' widget.



Modelo Predictivo usando Machine Learning

AUC:

AUCROC mide la capacidad del modelo para discriminar entre clases positivas y negativas.

Accuracy (CA):

Predicciones correctas/todas las predicciones.

Útil con clases están equilibradas

Precision (Prec):

Predicciones correctas/predicciones positivas.

Útil si costo de los falsos positivos

Recall:

Verdaderos positivos/casos reales positivos.

Útil si costo de los falsos negativos es

F1 Score:

Promedio armónico entre precision y recall.

Útil para un balance entre precisión y recall.

Casos de Uso en IA

IA GENERATIVA



CASO 1. INTERMEDIO

**Asistente de gestión de
Ofertas en un SFH**

MACHINE LEARNING



CASO 2. AVANZADO

**Modelo ML de
predicción de niveles
tóxicos o
subterapéuticos de
voriconazol**



A CORUÑA
17-19 OCT 24

Gracias por su atención

ivanmaraymateos@gmail.com

69

**CONGRESO
NACIONAL**

SOCIEDAD ESPAÑOLA DE
FARMACIA HOSPITALARIA

