Introducción

Las redes neuronales artificiales son un modelos computacionales capaces de imitar las características básicas del cerebro humano, autoadaptabilidad, autoorganización y tolerancia a errores (Quiñones-Huatangari \textit{et al.} 2020) durante las últimas dos décadas, sus aplicaciones han crecido exponencialmente, debido a que permiten la solución a problemas que son susceptibles a la estadística convencional, por consiguiente, los modelos que se originan son adecuados para describir pronósticos para tiempos más prolongados, además de relaciones no lineales, por ende, es difícil prescribir la relación matemática exacta entre los parámetros. Se puede resumir, que han sido ampliamente adoptadas para la identificación, análisis, pronóstico, reconocimiento del sistema y optimización del diseño de modelos (Flores-López y Fernández-Fernández 2008, citados en Quiñones-Huatangari \textit{et al.} 2020).

A inicios del mileno, se concebía a las redes neuronales como eficientes para tareas como reconocimiento de patrones, optimización o clasificación, de tal manera, que ya se podían integrar a sistemas de ayuda para la toma de decisiones, pero no son una panacea capaz de resolver todos los problemas, sino que, por el contrario, son modelos muy especializados que pueden aplicarse en dominios muy concretos. Para aquellos años, la red neuronal más utilizada fue la del Percetrón Multicapa (Multi-Layer Perceptron). Esta es una red de varias capas, usualmente tres (entrada, oculta y salida) que utiliza funciones sigmoidales (o similares como la tangente) como funciones de transferencia en la capa oculta. Las funciones de la capa de salida pueden ser lineales o sigmoidales, dependiendo del tipo de salida que se quiera. Sin embargo, la característica más importante de este modelo es que utiliza como función de aprendizaje la regla de Backpropagation (Pérez-Ramírez y Fernández-Castaño 2007).

La red neuronal artificial llamada perceptrón multicapas (MLP), usando el algoritmo de backpropagation ha sido aplicado a la solución de diversos problemas prácticos (Mehra y Wah, 1997; Haykin, 1994, citados en Sánchez \textit{et al.} 2004). El perceptrón multicapas consiste en al menos tres capas: Una capa de entrada, una o más capas ocultas y una capa de salida. Para la cuál, el número de neuronas de las capas de entrada y salida depende de cada aplicación en particular (Sánchez \textit{et al.} 2004).

El MLP figura dentro de los tipos de redes neuronales artificiales (RNA) con resultados útiles en los estudios de relación estructura-actividad, ya que permiten el análisis de datos tanto lineales como no lineales (Mejíaz-Cesar \textit{et al.} 2013).

Sin embargo, aunque el funcionamiento depende en forma importante del número de nodos en las capas ocultas, no existe un método confiable que permita determinar con precisión el número óptimo de estos, aun para alguna o algunas aplicaciones en particular (Sánchez \textit{et al.} 2004).

Como definición, podemos entender a las redes neuronales supervisadas como técnicas para extraer datos a partir de las relaciones de entradas-salidas y para almacenar tales relaciones en ecuaciones matemáticas que pueden utilizarse en actividades de pronóstico para la toma de decisiones. Existen redes que requieren que el usuario especifique la salida deseada para que la red pueda aprender a detectar una relación entre estas entradas y salidas suministradas, mediante procesos iterativos; una vez entrenada la red, se pueden utilizar con datos que nunca haya visto o puede ser incluida en un programa para la toma de decisiones (Pérez-Ramírez y Fernández-Castaño \textit{et al.} 2007).