# aguas-subterraneas

November 16, 2022

## 0.0.1 Reto Final - Parte 1

• Integrantes:

- Rafael J. Mateo C - A01793054

- Matthias Sibrian - A01794249

• Materia: Ciencia y Analítica de Datos

• Profesor: María de la Paz

• Fecha: 16 Nov 2022

```
[]: import pandas as pd
  import numpy as np
  import seaborn as sns
  import matplotlib.pyplot as plt
  from matplotlib.colors import LinearSegmentedColormap
  from sklearn.base import BaseEstimator, TransformerMixin
  import geopandas as gpd
  from shapely.geometry import Point
  from sklearn import metrics
  import seaborn as sns
  from sklearn.cluster import KMeans
  from sklearn.pipeline import Pipeline
  from sklearn.impute import SimpleImputer
  from sklearn.preprocessing import Normalizer
  from sklearn.compose import ColumnTransformer
```

## 0.0.2 I. Análisis Exploratorio de los Datos

DLAGU6516 POZO RO13 CA ADA HONDA

DLAGU7

Comencemos importando los datos que estaremos usando. Para fines de este ejercio, nos apoyaremos de la base de datos de aguas subterráneas.

POZO COSIO

LERMA SANTIAGO PACIFICO

LERMA SANTIAGO PACIFICO

3 DLAGU9 POZO 4 DLBAJ107 RANCH		LERMA SANTIAGO PACIFICO PENINSULA DE BAJA CALIFORNIA				
ESTADO O AGUASCALIENTES 1 AGUASCALIENTES 2 AGUASCALIENTES 3 AGUASCALIENTES	AGUASCALIENT COS	PIO ACUIFERO SUBTIPO \ COS VALLE DE CHICALOTE POZO CES VALLE DE CHICALOTE POZO CSIO VALLE DE AGUASCALIENTES POZO CHOS VALLE DE AGUASCALIENTES POZO				
4 BAJA CALIFORNIA SUR	LA P	PAZ TODOS SANTOS POZO				
0 SI 1 SI	2020 2020 2020 2020 2020 2020 SI SI	CUMPLE_CON_DUR CUMPLE_CON_CF \ SI PLE_CON_CD CUMPLE_CON_CR CUMPLE_CON_HG SI SI SI SI SI SI SI	`			
2 SI	NO	SI SI SI				
3 SI 4 NO	SI SI	SI SI SI SI SI SI				
CUMPLE_CON_PB CUMPLE_CON_MN CUMPLE_CON_FE						
0 SI	SI	SI				
1 SI	SI	SI				
2 SI	SI	SI				
3 SI	SI	SI				
4 SI	SI	SI				

[5 rows x 57 columns]

## []: df.info()

<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 1068 entries, 0 to 1067
Data columns (total 57 columns):

#	Column	Non-Null Count	Dtype
0	CLAVE	1068 non-null	object
1	SITIO	1068 non-null	object
2	ORGANISMO_DE_CUENCA	1068 non-null	object
3	ESTADO	1068 non-null	object
4	MUNICIPIO	1068 non-null	object
5	ACUIFERO	1068 non-null	object
6	SUBTIPO	1068 non-null	object
7	LONGITUD	1068 non-null	float64

0	I ATTIID	1069 non-null	flos+6/
8 9	LATITUD PERIODO	1068 non-null 1068 non-null	float64 int64
10	ALC_mg/L	1064 non-null	float64
11	CALIDAD_ALC	1064 non-null	object
12	CONDUCT_mS/cm	1062 non-null	float64
13	CALIDAD_CONDUC	1062 non-null	
	<del>-</del>		object float64
14 15	SDT_mg/L	0 non-null	
15 16	SDT_M_mg/L	1066 non-null 1066 non-null	object
	CALIDAD_SDT_ra	1066 non-null	object
17	CALIDAD_SDT_salin		object
18	FLUORUROS_mg/L	1068 non-null	object
19	CALIDAD_FLUO	1068 non-null	object
20	DUR_mg/L	1067 non-null	object
21	CALIDAD_DUR	1067 non-null	object
22	COLI_FEC_NMP/100_mL	1068 non-null	object
23	CALIDAD_COLI_FEC	1068 non-null	object
24	N_NO3_mg/L	1067 non-null	object
25	CALIDAD_N_NO3	1067 non-null	object
26	AS_TOT_mg/L	1068 non-null	object
27	CALIDAD_AS	1068 non-null	object
28	CD_TOT_mg/L	1068 non-null	object
29	CALIDAD_CD	1068 non-null	object
30	CR_TOT_mg/L	1068 non-null	object
31	CALIDAD_CR	1068 non-null	object
32	HG_TOT_mg/L	1068 non-null	object
33	CALIDAD_HG	1068 non-null	object
34	PB_TOT_mg/L	1068 non-null	object
35	CALIDAD_PB	1068 non-null	object
36	MN_TOT_mg/L	1068 non-null	object
37	CALIDAD_MN	1068 non-null	object
38	FE_TOT_mg/L	1068 non-null	object
39	CALIDAD_FE	1068 non-null	object
40	SEMAFORO	1068 non-null	object
41	CONTAMINANTES	634 non-null	object
42	CUMPLE_CON_ALC	1068 non-null	object
43	CUMPLE_CON_COND	1068 non-null	object
44	CUMPLE_CON_SDT_ra	1068 non-null	object
45	CUMPLE_CON_SDT_salin	1068 non-null	object
46	CUMPLE_CON_FLUO	1068 non-null	object
47	CUMPLE_CON_DUR	1068 non-null	object
48	CUMPLE_CON_CF	1068 non-null	object
49	CUMPLE_CON_NO3	1068 non-null	object
50	CUMPLE_CON_AS	1068 non-null	object
51	CUMPLE_CON_CD	1068 non-null	object
52	CUMPLE_CON_CR	1068 non-null	object
53	CUMPLE_CON_HG	1068 non-null	object
54	CUMPLE_CON_PB	1068 non-null	object
55	CUMPLE_CON_MN	1068 non-null	object

```
56 CUMPLE_CON_FE 1068 non-null object dtypes: float64(5), int64(1), object(51) memory usage: 475.7+ KB
```

Obtengamos las columnas que tienen valores vacíos y la cantidad de nulos por cada columna

```
[]: na_columns = df.columns[df.isna().any()].tolist()
    na_total = df[na_columns].isna().sum()

pd.DataFrame({'columns': na_columns, 'total': na_total.to_list() })
```

```
[]:
                     columns
                               total
     0
                    ALC_mg/L
                                   4
     1
                CALIDAD ALC
                                    4
     2
              CONDUCT_mS/cm
                                    6
     3
             CALIDAD_CONDUC
                                    6
     4
                    SDT_mg/L
                                1068
     5
                 SDT_M_mg/L
                                   2
     6
             CALIDAD_SDT_ra
                                   2
     7
          CALIDAD_SDT_salin
                                   2
     8
                    DUR mg/L
                                   1
     9
                CALIDAD_DUR
                                    1
     10
                 N_NO3_mg/L
                                    1
     11
              CALIDAD_N_NO3
                                    1
     12
              CONTAMINANTES
                                 434
```

De la tabla anterior se puede apreciar que la columna de Solidos Totales Disueltos (SDT\_mg/L) está completamente vacía. La segunda columna con mayor cantidad de nulos es Contaminantes, sin embargo, esta es de esperarse puesto que hay mediciones de agua que no arrojan contaminantes. En otras palabras, un valor nulo en esta columna equivale a ausencia de contaminantes en el agua.

Las demás columnas presentan pocas observaciones nulas. Más adelante definiremos una estrategia para de imputación para estas columnas con valores faltantes.

Del resultado anterior se observa columnas que contienen la misma información pero en tipo de datos diferentes. También hay columnas numéricas detectadas como tipo "object". Vamos a extraer primero todas las columnas categóricas y binarias, ya que son candidatas a ser eliminadas.

Ahora revisemos una de las columnas numéricas que fueron detectadas como object. Tomaremos un ejemplo con Cadmio ( $CD\_TOT\_mg/L$ )

De lo anterior se observa que valores muy pequeños son colocados como "<". Para ello, vamos a reemplazar este string por un valor arbitrario por debajo del umbral, de manera que podamos crear una cota inferior y así analizarlo por medio de un histograma o boxplot.

<pandas.io.formats.style.Styler at 0x17ce23c70>

Se observan que 12 variables tienen valores string. Vamos a proceder sustituir estos strings por valores numéricos.

```
attributes attr_values
0
            AS_TOT_mg/L
                                0.01
1
            CD_TOT_mg/L
                               0.003
2
                               0.025
            FE_TOT_mg/L
3
             SDT M mg/L
                                   25
         FLUORUROS_mg/L
4
                                 0.2
5
    COLI_FEC_NMP/100_mL
                                 1.1
6
            CR_TOT_mg/L
                               0.005
7
               DUR_mg/L
                                   20
```

```
9
                MN_TOT_mg/L
                                  0.0015
                 N_NO3_mg/L
    10
                                   0.02
    11
                PB_TOT_mg/L
                                  0.005
[]: #Sustituimos los valores string por un valor float arbitrario, que se encuentre_
      →por debajo de lo indicado por la columna
     for col in columns:
        val = (limits_df.loc[limits_df.attributes == col].attr_values.values[0])
        str_match = '<'+ val
        val = float(val)
        df.loc[df[col] == str_match, col] = val -(val/10)
        #Convertimos la columna a tipo float
        df[col] = df[col].astype(float)
```

0.0005

```
[]: #Probamos la conversión con una de las columnas df[['FE_TOT_mg/L']].sort_values(by = 'FE_TOT_mg/L', ascending = False)
```

```
[]:
           FE_TOT_mg/L
     425
               178.6150
     331
                16.4371
     9
                14.0600
     799
                13.4400
     561
                 7.3820
     675
                 0.0225
     672
                 0.0225
     671
                 0.0225
     670
                 0.0225
     1067
                 0.0225
```

8

HG\_TOT\_mg/L

[1068 rows x 1 columns]

Ahora procedamos a revisar los valores únicos para cada variable numérica. Esto nos ayudará a decidir si valdría la pena usar la versión binaria o categórica en vez de alguna variable numérica.

```
[]: uniques = {'attributes': [], 'unique_vals': []}
for col in vars:
    uniques['attributes'].append(col)
    uniques['unique_vals'].append(df[col].unique().size)

pd.DataFrame(uniques)
```

```
2
             CD_TOT_mg/L
                                      3
3
            FE_TOT_mg/L
                                    615
4
              SDT_M_mg/L
                                    926
                SDT_mg/L
5
                                      1
6
         FLUORUROS_mg/L
                                    862
    COLI_FEC_NMP/100_mL
7
                                    125
          CONDUCT_mS/cm
                                    802
8
9
             CR_TOT_mg/L
                                    168
                DUR mg/L
10
                                    890
             HG_TOT_mg/L
11
                                     61
            MN_TOT_mg/L
12
                                    362
13
              N_NO3_mg/L
                                    996
14
            PB_TOT_mg/L
                                     31
```

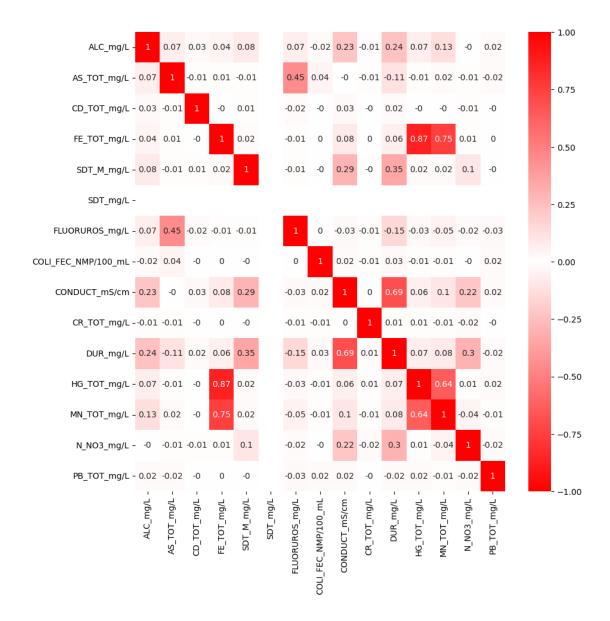
Name: CD\_TOT\_mg/L, dtype: int64

De la tabla anterior, el atributo Solidos Disueltos Totales (SDT\_mg/L) está completamente vacío y por eso aparece que tiene solo un valor único, como veremos más adelante. En el caso de Cadmio (CD\_TOT), este tiene apenas 3 valores únicos. Revisemos cuáles son estos valores.

De lo anterior se puede apreciar que casi el 100% de las observaciones caen dentro del rango aceptable (<0.003), mientras que los otros dos valores no cumplen con el parámetro requerido (>0.005). Esto significa que podríamos perfectamente usar la variable binaria correspondiente a este atributo, ya que la información proporcionada es exactamente la misma.

Ahora revisemos la correlación entre cada una de las variables del conjunto de datos.

[]: <AxesSubplot: >



Para realizar el análisis de correlación, usaremos como umbral para definir correlación fuerte aquellas variables que tengan un coeficiente >= 0.75. Basado en este criterio, podemos observar que tres variables están altamente correlacionadas:

- Mercurio (HG)
- Manganeso (MN)
- Hierro (FE)

```
[]: df[['HG_TOT_mg/L', 'MN_TOT_mg/L', 'FE_TOT_mg/L']].isna().any()
```

```
[]: HG_TOT_mg/L False
MN_TOT_mg/L False
FE_TOT_mg/L False
```

#### dtype: bool

Ahora revisemos los campos vacíos de las demás variables que no tienen una correlación alta, basada en el criterio definido arriba

```
[]: na_columns = df.columns[df.isna().any()].tolist()
    na_total = df[na_columns].isna().sum()

pd.DataFrame({'columns': na_columns, 'total': na_total.to_list() })
```

```
[]:
                     columns
                               total
     0
                    ALC mg/L
                                   4
     1
                CALIDAD ALC
                                    4
     2
              CONDUCT_mS/cm
                                   6
     3
             CALIDAD CONDUC
                                   6
     4
                   SDT_mg/L
                                1068
     5
                 SDT_M_mg/L
                                   2
     6
             CALIDAD_SDT_ra
                                    2
     7
         CALIDAD_SDT_salin
                                    2
     8
                   DUR_mg/L
                                    1
     9
                CALIDAD DUR
     10
                 N_NO3_mg/L
                                    1
     11
              CALIDAD_N_NO3
                                    1
     12
              CONTAMINANTES
                                 434
```

De la tabla anterior se aprecia que ninguna de las variables altamente correlacionadas cuentan con campos vacíos. También se puede observar que variables con una correlación relativamente alta, como Conductividad y Dureza (coef = 0.69), cuentan con campos vacíos. Para estas dos variables podríamos apoyarnos de la información de la correlación para definir una estrategia de imputación.

En el caso de la variable "SDT\_mg/L", esta se encuentra completamente vacía, sin embargo, esta tiene una relación directa con la conductividad del agua, donde puede ser calculada con la siguiente fórmula: (https://iwaponline.com/wst/article/77/8/1998/38602/Relationship-between-total-dissolved-solids-and):

```
TDS (mg/L) = Ke \times EC(uS/cm)
```

donde Ke es un factor que normalmente varía entre 0.55 a 0.85 y EC es la conductividad del agua.

Como la relación de los sólidos totales disueltos es directamente proporcional a la conductividad del agua, esta variable puede ser eliminada para fines de entrenar el modelo, ya que estaría altamente correlacionada con la conductividad, y por ende proporcionar la misma información para el modelo.

Por otro lado, la segunda columna con mayor cantidad de nulos es Contaminantes, sin embargo, esta es de esperarse puesto que hay mediciones de agua que no arrojan contaminantes. En otras palabras, un valor nulo en esta columna equivale a ausencia de contaminantes en el agua.

Las demás columnas presentan pocas observaciones nulas.

#### Conclusiones de esta sección

De esta sección concluimos lo siguiente:

- 1. Las columnas de Mercurio, Manganeso están altamente correlacionadas con Hierro, por lo que podemos eliminar dos de ellas. Para este caso, nos quedaremos solamente con la columna de Hierro.
- 2. La variable "SDT\_mg/L" tiene todos los campos vacíos, sin embargo, este valor es directamente proporcional a la conductividad. En este sentido, podemos eliminar esta columna ya que estaría altamente correlacionada con la conductividad.
- 3. La variable "Contaminantes" puede ser eliminada, ya que esto solo indica los contaminantes cuando el agua no es apta para su uso. Esta información no agregaría valor al modelo.
- 4. La variable "CD\_TOT" solo tiene dos valores únicos, por lo que puede eliminarse y reemplazarse en su lugar por su variable binaria correspondiente (CUMPLE\_CON\_CD).
- 5. Las demás variables binarias y categóricas pueden ser eliminadas ya que se estarán utilizando las variables numéricas en su lugar.

En la próxima sesión definiremos la estrategia de imputación.

#### 0.0.3 II. Estrategia de Imputación

En esta sección definiremos la mejor manera de imputar los datos vacíos y nulos. Para ello comencemos primero con las variables "Conductividad" y "Dureza", las cuales mostraron una correlación relativamente alta en la sección anterior.

Comencemos primero revisando que porcentaje de las variables "CUMPLE\_CON\_COND" y "CUMPLE\_CON\_DUR" coincide en sus valores. Debido a la correlación de 0.69 obtenida en la sección anterior, es de esperarse que un alto porcentaje coincida.

Ahora procederemos a definir las columnas que estaremos eliminado, como concluímos en la sección #1.

```
Numeric variables: ['ALC_mg/L', 'CONDUCT_mS/cm', 'SDT_M_mg/L', 'FLUORUROS_mg/L',
'DUR_mg/L', 'COLI_FEC_NMP/100_mL', 'N_NO3_mg/L', 'AS_TOT_mg/L', 'CR_TOT_mg/L',
'HG_TOT_mg/L', 'PB_TOT_mg/L', 'MN_TOT_mg/L', 'FE_TOT_mg/L']
```

```
Categorical variables: ['CALIDAD_ALC', 'CALIDAD_CONDUC', 'CALIDAD_SDT_ra', 'CALIDAD_SDT_salin', 'CALIDAD_FLUO', 'CALIDAD_DUR', 'CALIDAD_COLI_FEC',
```

```
'CALIDAD_N_NO3', 'CALIDAD_AS', 'CALIDAD_CD', 'CALIDAD_CR', 'CALIDAD_HG',
'CALIDAD_PB', 'CALIDAD_MN', 'CALIDAD_FE', 'LONGITUD', 'LATITUD', 'SUBTIPO',
'SEMAFORO']

Binary variables: ['CUMPLE_CON_ALC', 'CUMPLE_CON_COND', 'CUMPLE_CON_SDT_ra',
'CUMPLE_CON_SDT_salin', 'CUMPLE_CON_FLUO', 'CUMPLE_CON_DUR', 'CUMPLE_CON_CF',
'CUMPLE_CON_NO3', 'CUMPLE_CON_AS', 'CUMPLE_CON_CD', 'CUMPLE_CON_CR',
'CUMPLE_CON_HG', 'CUMPLE_CON_PB', 'CUMPLE_CON_MN', 'CUMPLE_CON_FE']
```

```
[]: #Al existir una alta correlación entre conductividad y dureza, las columnas de cumplimiento coinciden en casi el 85% de las veces. Se podría imputar una de estas columna con el valor correspondiente de la otra len(df[df['CUMPLE_CON_COND'] == df['CUMPLE_CON_DUR']])/len(df)
```

#### []: 0.849250936329588

Cerca de 85% de las observaciones tienen valores iguales entre las columnas de "CUMPLE\_CON\_COND" y "CUMPLE\_CON\_DUR", como era de esperarse. Esta información podemos usarla para definir una estrategia de imputación personalizada, tanto para dureza como conductividad.

```
[]: class WaterFeaturesImputer (TransformerMixin, BaseEstimator):
        def __transformHardness(self, X):
            X.loc[(X['DUR_mg/L'].isna()) & (X['CUMPLE_CON_COND'] == 'SI'), 'DUR_mg/
     →L'] = \
               X[X['CUMPLE_CON_COND'] == 'SI']['DUR_mg/L'].median()
            X.loc[(X['DUR_mg/L'].isna()) & (X['CUMPLE_CON_COND'] == 'NO'), 'DUR_mg/
     →L'] = \
               X[X['CUMPLE CON COND'] == 'NO']['DUR mg/L'].median()
            return X
        def __transformConductivity(self, X):
            X.loc[(X['CONDUCT_mS/cm'].isna()) & (X['CUMPLE_CON_DUR'] ==__
      X[X['CUMPLE_CON_DUR'] == 'SI']['CONDUCT_mS/cm'].median()
            X.loc[(X['CONDUCT_mS/cm'].isna()) & (X['CUMPLE_CON_DUR'] ==__
     X[X['CUMPLE_CON_DUR'] == 'NO']['CONDUCT_mS/cm'].median()
            return X
        def fit(self, X, y = None):
```

```
return self
         def transform(self, X, y = None):
             X_{copy} = X.copy()
             X_copy = self.__transformHardness(X_copy)
             X_copy = self.__transformConductivity(X_copy)
             X_copy = X_copy.drop(['CUMPLE_CON_DUR', 'CUMPLE_CON_COND'], axis = 1)
             X_copy = X_copy[num_vars].fillna(X_copy[num_vars].median())
             return X_copy
    Probemos que el imputador funciona
[]: impt = WaterFeaturesImputer()
     df.dtypes
     res = impt.transform(df)
     res['CONDUCT_mS/cm'].isna().sum()
[]: 0
[]: res['DUR_mg/L'].isna().sum()
[]: 0
[]: #Para fines del análisis descriptivo, sacamos Longitud y Latitud, ya que estasu
      ⇔variables son identificadores
     df_final_cols.drop(['LONGITUD', 'LATITUD'], axis = 1).describe()
[]:
               ALC_mg/L
                        CONDUCT_mS/cm
                                          SDT_M_mg/L FLUORUROS_mg/L
                                                                          DUR_mg/L \
     count 1064.000000
                           1062.000000
                                         1066.000000
                                                          1068.000000
                                                                       1067.000000
    mean
             235.633759
                           1138.953013
                                          896.099221
                                                             1.072566
                                                                        347.889338
    std
             116.874291
                           1245.563674
                                         2751.531334
                                                             1.925673
                                                                        359.714059
    min
              26.640000
                                                             0.180000
                             50.400000
                                           22.500000
                                                                         18.000000
    25%
             164.000000
                            501.750000
                                           337.500000
                                                             0.267175
                                                                        121.194800
    50%
             215.527500
                            815.000000
                                           550.400000
                                                             0.503500
                                                                        245.335800
    75%
             292.710000
                           1322.750000
                                           916.100000
                                                             1.139850
                                                                        453.930000
            1650.000000
                          18577.000000 82170.000000
                                                            34.803300
                                                                       3810.692200
    max
            COLI_FEC_NMP/100_mL
                                  N_NO3_mg/L
                                               AS_TOT_mg/L
                                                            CR_TOT_mg/L
                    1068.000000
                                 1067.000000
                                               1068.000000
                                                            1068.000000
     count
                                    4.319637
     mean
                     355.414448
                                                  0.018855
                                                               0.012876
     std
                    2052.470134
                                    8.345197
                                                  0.035420
                                                               0.154413
                       0.990000
                                    0.018000
                                                  0.009000
                                                               0.004500
    min
```

25% 50% 75% max	0	.990000 .990000 .250000	2	.650294 .080932 .201698 .007813	0	.009000 .009000 .009000 .452200	0.	004500 004500 004500 003200
	HG_TOT_mg/L	PB_TOT_mg	_	MN_TOT_mg	_	FE_TOT_mg	_	
count	1068.000000	1068.0000	000	1068.000	000	1068.0000	000	
mean	0.000512	0.0047	796	0.072	401	0.4094	149	
std	0.000473	0.0032	297	0.376	527	5.5380	039	
min	0.000450	0.0049	500	0.0013	350	0.0225	500	
25%	0.000450	0.0045	500	0.0013	350	0.0225	500	
50%	0.000450	0.0045	500	0.0013	350	0.0469	960	
75%	0.000450	0.0045	500	0.0099	947	0.1733	380	
max	0.014150	0.0809	900	8.9820	000	178.6150	000	

Si bien la mayoría de las variables tienen la misma unidad de medida, sus valores umbrales para definir la calidad del agua son diferentes. Por ejemplo, dureza debe ser menor  $< 60~\rm mg/L$ , mientras que los nitratos deben estar por debajo de  $5~\rm mg/L$  y el mercurio por debajo de  $0.006~\rm mg/L$ . Esto significa que sería importante aplicar un escalamiento, para evitar que el modelo a entrenar de más peso a una variable que otra.

Otro aspecto a destacar del análisis descriptivo es la presencia de valores atípicos. Por ejemplo, la dureza tiene un valir máximo de 3,810, cuando su media es de 346 y su mediana de 241.

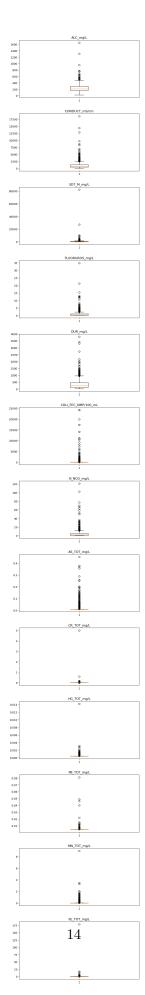
Hagamos un análisis gráfico de las variables para revisar su distribución y comportamiento.

```
[]: cols_to_plot = df_final_cols.drop(cat_vars, axis = 1).columns

[]: fig, axes = plt.subplots(13)
    fig.set_size_inches(7,50)
    plt.tight_layout(h_pad = 4)

    count = 0

for i in range(13):
        axes[i].boxplot(df_final_cols[num_vars[i]].dropna())
        axes[i].set_title(num_vars[i])
```



De los diagramas de cajas presentados arriba se confirma la presencia de valores atípicos para todas las variables numéricas. Esto representa un problema para el algoritmo K-means, puesto a que es sensible a valores atípicos. Sin embargo, para modelos de clasificación como Árboles de Decisión o Random Forest, la presencia de los atípicos no suponen un problema para estos modelos. Como veremos más adelante, para minimizar el efecto de los atípicos estaremos usando la función "Normalizer" de la librería.

Ahora veamos la composición de la variable de salida 'SEMAFORO'

```
[]: (df_final_cols.SEMAFORO.value_counts()/len(df_final_cols)) * 100
```

[]: Verde 40.636704 Rojo 36.235955 Amarillo 23.127341

Name: SEMAFORO, dtype: float64

Del análisis anterior se evidencia que la clase 'Amarillo' se encuentra ligeramente subrepresentada. Sin embargo, una representación equitativa de cada clase equivaldría a un 33%, por lo que tampoco se encuentra muy lejos de este valor.

Para fines de este ejercicio no tomaríamos en cuenta estrategias para balanceo de clases por lo explicado arriba.

III. Generación de Clústers por Kmeans En esta sección estaremos agrupando las observaciones por clústers, a través del algortimo de KMeans. La agrupación de las observaciones la haremos de la siguiente manera:

- 1. Por variables numéricas. Por medio de esta estrategia veremos si el algoritmo kmeans encuentra algún patrón de agrupamiento de las observaciones. Para esto debemos tomar en cuenta que los datos deben escalarse, ya que existen atípicos que pueden afectar el desempeño de este algoritmo, como vimos en la sección anterior.
- 2. Por coordenadas. Esto nos permitirá obtener obtener los centros de cada clúster y visaulizarlos en el mapa, y a partir de ahí obtener la moda del semáforo de cada centro para conocer cuál de estos valores es el que predomina para cada clúster.

#### 3.1. Kmeans por variables numéricas

Comencemos primero creando los pipelines para imputar y transformar los datos que estaremos usando para el kmeans. Debido a la presencia de atípicos, estaremos usando "Normalizer" para buscar que los atípicos se encuentren en una misma escala, así como buscar una distribución más uniforme.

Existen otros métodos de escalamiento de datos, como el MinMaxScaler y StandardScaler, sin embargo, estos son sensibles a valores atípicos extremos.

```
[]: catImp_pipeline = Pipeline(steps = [('impModa', U) SimpleImputer(strategy='most_frequent'))])
custom_pipeline = Pipeline(steps=[
```

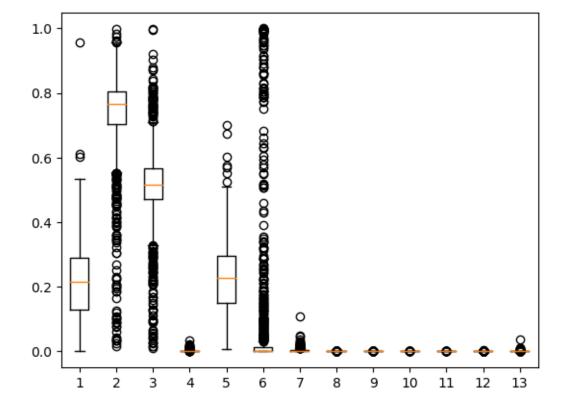
```
('scaler', Normalizer())
     ])
     columnasTransformer = ColumnTransformer(transformers = [
         ('catimp', catImp_pipeline, cat_vars + bin_vars),
         ('custom-imp', custom_pipeline, (num_vars + ['CUMPLE_CON_COND', __
      ],
        remainder='drop')
     pipeline = Pipeline(
         steps=[
             ('ct', columnasTransformer),
             1)
     scaled f = pipeline.fit transform(df)
     #Imprimimos una muestra de los datos transformados
     scaled f[:3,:]
[]: array([['Alta', 'Permisible para riego', 'Cultivos sensibles',
             'Potable - Dulce', 'Potable - Optima', 'Potable - Dura',
             'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente', 'Apta como FAAP',
             'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente',
             'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente',
             'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente', -102.0221,
            22.20887, 'POZO', 'Verde', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI',
             'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI',
            0.19819882176400136, 0.8100651874349375, 0.5201652629103493,
            0.0008416060234563403, 0.1841881411072809, 0.0008531537612346682,
            0.0036062171776497193, 1.387452076351329e-05,
            3.877971641975765e-06, 3.877971641975764e-07,
            3.877971641975765e-06, 1.1633914925927293e-06,
            7.678383851112013e-05],
            ['Alta', 'Buena para riego', 'Excelente para riego',
             'Potable - Dulce', 'Potable - Optima', 'Potable - Dura',
             'Potable - Excelente', 'Potable - Buena calidad',
             'Apta como FAAP', 'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente',
             'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente',
             'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente', -102.20075,
            21.99958, 'POZO', 'Verde', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI',
             'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'SI',
            0.2863979242915282, 0.7505924305756677, 0.5498583364776355,
            0.0011478632268902232, 0.2284509541240627, 0.0012221817537334063,
```

('hardness-imputer', WaterFeaturesImputer()),

```
0.0070986661858181786, 1.6542662121240043e-05,
5.55537160787912e-06, 5.555371607879119e-07,
5.55537160787912e-06, 1.6666114823637358e-06,
2.77768580393956e-05],
['Alta', 'Buena para riego', 'Excelente para riego',
 'Potable - Dulce', 'Alta', 'Potable - Dura',
 'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente',
'No apta como FAAP', 'Potable - Excelente',
 'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente',
 'Potable - Excelente', 'Potable - Excelente',
 'Potable - Excelente', -102.28801, 22.36685, 'POZO', 'Rojo',
 'SI', 'SI', 'SI', 'SI', 'NO', 'SI', 'SI', 'SI', 'NO', 'SI', 'SI',
 'SI', 'SI', 'SI', 0.3032742912723891, 0.7873410255558804,
0.5061478021430659, 0.002670595640254861, 0.178659814406166,
0.0014651646904141383, 0.00214565673096615,
5.4758680348811224e-05, 6.659839501882447e-06,
6.659839501882446e-07, 6.659839501882447e-06,
1.997951850564734e-06, 3.3299197509412235e-05]], dtype=object)
```

Veamos como quedaron los datos luego de ser escalados

```
[]: plt.boxplot(x = ((scaled_f[:,34:])))
plt.show()
```



Aún se observan la presencia de atípicos, sin embargo, estos se encuentran en la misma escala, el cual es el resultado que queremos. Ahora procedamos a generar el número óptimo de clústeres, tanto por el método del codo como por el método de siluetas.

```
from sklearn.cluster import KMeans
K = range(1,15)

wss = []

for k in K:
    kmeans = KMeans(n_clusters=k, init='k-means++')

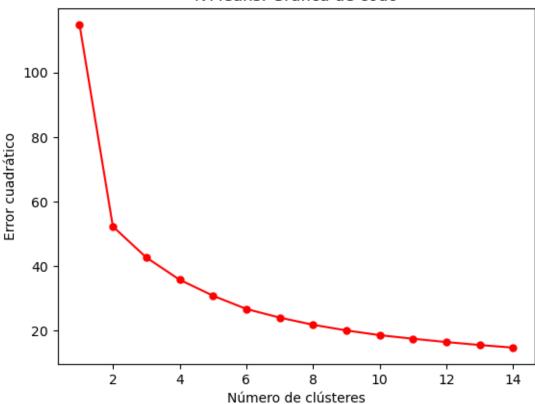
    kmeans = kmeans.fit(scaled_f[:,34:])
    wss_iter = kmeans.inertia_
    wss.append(wss_iter)

centers = pd.DataFrame({'Clusters': K, 'WSS': wss})

import seaborn as sns
plt.plot(centers.Clusters, centers.WSS, 'ro-', markersize = 5)
plt.xlabel('Número de clústeres')
plt.ylabel('Error cuadrático')
plt.title('K-Means: Gráfica de codo')
```

```
[]: Text(0.5, 1.0, 'K-Means: Gráfica de codo')
```

## K-Means: Gráfica de codo

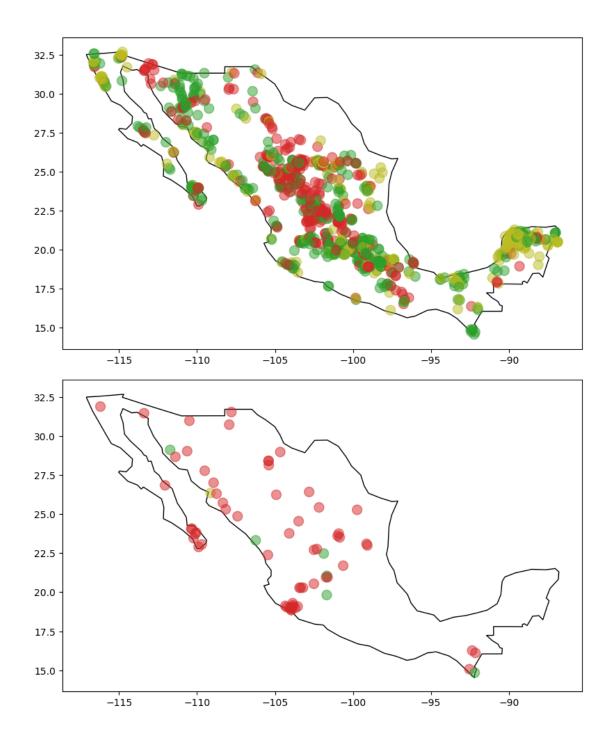


```
Silhouette score for k(clusters) = 2 is 0.7285495977148867
Silhouette score for k(clusters) = 3 is 0.3277586102705237
Silhouette score for k(clusters) = 4 is 0.24639306498983482
Silhouette score for k(clusters) = 5 is 0.2554126446100517
Silhouette score for k(clusters) = 6 is 0.2617335482584944
Silhouette score for k(clusters) = 7 is 0.26267633228091436
Silhouette score for k(clusters) = 8 is 0.2653528506055504
```

Silhouette score for k(clusters) = 9 is 0.2565633266250199

Tanto el método del codo como el método de siluetas coinciden en que el número óptimo de clústers es de 2. Tomemos esta información para el modelo final.

```
[]: k = 2 #Número óptimo de clústers
     kmeans = KMeans(n_clusters = k, init ='k-means++')
     kmeans.fit(scaled_f[:,34:])
     #Asignamos cada clúster a nuestros datos
     df_final_cols['labels'] = kmeans.labels_
     df_final_cols['labels'].head()
[]: 0
     1
     2
         0
     3
         0
     4
     Name: labels, dtype: int32
[]: #Obtengamos los mapas
     world = gpd.read_file(gpd.datasets.get_path("naturalearth_lowres"))
     world = world.set_index("iso_a3")
     #Generemos las coordenadas
     df_final_cols["Coordinates"] = list(zip(df_final_cols.LONGITUD, df_final_cols.
      →LATITUD))
     df_final_cols["Coordinates"] = df_final_cols["Coordinates"].apply(Point)
     #Construimos el dataframe
     gdf = gpd.GeoDataFrame(df_final_cols, geometry="Coordinates")
[]: #Generamos un mapeo de los colores
     color_map = {
         'Verde': 'tab:green',
         'Rojo': 'tab:red',
         'Amarillo': 'tab:olive'
     }
     fig, gax = plt.subplots(k, figsize=(10,10))
     plt.tight_layout()
     #Generamos un mapa por clúster para mejor visibilidad de los puntos
     for i in range(k):
         #Graficamos el mapa de México
```



En el gráfico anterior llama la atención que el clúster #2 se compone mayormente de pozos donde la calidad del agua está contaminada. En el caso del clúster 1 se observa que este contiene pozos con una calidad de agua mixta, tanto potable como contaminada.

Veamos los datos más de cerca para entender mejor las diferencias entre estos dos clústers. Para esto generaremos estadísticas descriptiva por atributo y por clúster.

```
[]: for var in num_vars:
         #Estadísticos que nos interesa analizar
        dicc = {'mean':[], 'median': [], 'std': [], 'min': [], 'max':[], 'mode':[]}
         for i in range(k):
             #Obtenemos las observaciones correspndiente al clúster y variable
             col = df_final_cols[df_final_cols['labels'] == i][var]
             #Generamos los estadísticos
             dicc['mean'].append(col.mean())
             dicc['median'].append(col.median())
             dicc['std'].append(col.std())
             dicc['min'].append(col.min())
             dicc['max'].append(col.max())
             dicc['mode'].append(col.mode()[0])
        print(var)
        display(pd.DataFrame(dicc, index = ['Cluster 1', 'Cluster 2']))
    ALC_mg/L
                     mean
                            median
                                           std
                                                  min
                                                           max
                                                                  mode
               236.433225 215.715 118.889253
                                                26.64
                                                      1650.00
    Cluster 1
                                                                157.62
               223.737239
                                                                168.72
    Cluster 2
                           211.335
                                     80.896427
                                                89.38
                                                        455.52
    CONDUCT_mS/cm
                      mean median
                                            std
                                                   min
                                                            max
                                                                  mode
    Cluster 1
               1151.089246
                             830.0 1269.357431
                                                  50.4
                                                        18577.0
                                                                 777.0
    Cluster 2
                958.720896
                             731.0
                                     799.075171
                                                 226.0
                                                         4960.0
                                                                 495.0
    SDT_M_mg/L
                     mean median
                                                                 mode
                                           std
                                                  min
                                                           max
    Cluster 1 910.802506
                            556.0
                                   2837.892147
                                                 22.5
                                                       82170.0
                                                                292.0
    Cluster 2 676.866667
                            491.6
                                    578.320845
                                                151.6
                                                        3299.0
    FLUORUROS_mg/L
                   mean median
                                      std
                                            min
                                                     max
                                                          mode
    Cluster 1 1.078019 0.5163 1.935708 0.18
                                                 34.8033
                                                          0.18
    Cluster 2 0.991093 0.3326 1.780481 0.18
                                                12.5010 0.18
    DUR_mg/L
                              median
                                             std
                     mean
                                                   min
                                                                   mode
                                                              max
                                      361.451718 18.0
    Cluster 1
               349.086883
                           245.66235
                                                        3810.6922
                                                                   18.0
                           233.06400
                                      334.724789
    Cluster 2 330.015522
                                                  18.0 1649.9300
                                                                   18.0
    COLI_FEC_NMP/100_mL
                      mean
                             median
                                             std
                                                     min
                                                              max
                                                                      mode
    Cluster 1
                               0.99
                                      147.205160
                                                                      0.99
                 36.649980
                                                    0.99
                                                           2247.0
    Cluster 2 5117.850746
                                     6573.459933 430.00 24196.0 2400.00
                            2400.00
```

## N\_NO3\_mg/L

```
mean
                        median
                                      std
                                              min
                                                           max
                                                                 mode
Cluster 1
           4.366361
                      2.063471
                                 8.564357
                                            0.018
                                                   121.007813
                                                                0.018
Cluster 2
           3.622269
                      2.241700
                                 3.751902
                                            0.018
                                                     18.525663
                                                                0.018
AS_TOT_mg/L
                      median
                                    std
                                            min
                                                           mode
                mean
                                                    max
                       0.009
                               0.034536
                                          0.009
                                                 0.4522
                                                          0.009
Cluster 1
           0.018827
Cluster 2
           0.019270
                       0.009
                               0.047013
                                          0.009
                                                 0.3558
                                                          0.009
CR_TOT_mg/L
                mean
                      median
                                    std
                                             min
                                                     max
                                                             mode
           0.013374
                      0.0045
                               0.159487
                                          0.0045
                                                  5.0032
                                                           0.0045
Cluster 1
Cluster 2
           0.005426
                      0.0045
                               0.003360
                                          0.0045
                                                  0.0256
                                                           0.0045
HG_TOT_mg/L
                       median
                                     std
                                               min
                                                         max
                                                                 mode
                mean
Cluster 1
           0.000514
                      0.00045
                                0.000487
                                           0.00045
                                                    0.01415
                                                              0.00045
Cluster 2
           0.000479
                      0.00045
                                0.000157
                                           0.00045
                                                    0.00149
                                                              0.00045
PB_TOT_mg/L
                      median
                                    std
                                             min
                                                             mode
                mean
                                                      max
                               0.002588
Cluster 1
           0.004694
                      0.0045
                                          0.0045
                                                  0.0809
                                                           0.0045
Cluster 2
           0.006312
                      0.0045
                               0.008471
                                          0.0045
                                                  0.0490
                                                           0.0045
MN_TOT_mg/L
                       median
                                     std
                                               min
                                                       max
                                                               mode
                mean
Cluster 1
           0.072710
                      0.00135
                                0.384275
                                           0.00135
                                                    8.982
                                                            0.00135
           0.067798
                      0.00530
                                           0.00135
                                                     1.477
Cluster 2
                                0.233624
                                                            0.00135
FE_TOT_mg/L
                mean
                      median
                                    std
                                             min
                                                              mode
                                                       max
Cluster 1
           0.405031
                      0.0460
                               5.702692
                                          0.0225
                                                  178.615
                                                            0.0225
Cluster 2
           0.475451
                      0.0678
                               1.757041
                                          0.0225
                                                   14.060
                                                            0.0225
```

De lo anterior puede apreciarse lo siguiente:

- Para la mayoría de los atributos, el clúster 2 posee una desviación estándar más pequeña. Es de esperarse, puesto que este clúster tiene menos cantidad de observaciones.
- La variable Coliformes Fecales (COLI\_FEC\_NMP/100\_mL) es la que presenta valores más alto para el clúster #2. También se observa que su moda es de 2,400 NMP/100ML, muy por encima de los valores aceptables, el cual es de 1000 NMP/100ML.
- Los demás atributos se encuentran en un rango de excelente (potable) a aceptable.

De lo anterior se podría sospechar que la variable que mayor impacto tuvo en la división de los clústeres fue los Coliformes Fecales. Revisemos esta hipótesis más de cerca, pero ahora analizando las variables binarias.

```
[]: #Definimos las variables que nos interesa analizar
     vars = ['CUMPLE_CON_ALC', 'CUMPLE_CON_COND', 'CUMPLE_CON_SDT_ra',
            'CUMPLE_CON_SDT_salin', 'CUMPLE_CON_FLUO', 'CUMPLE_CON_DUR',
            'CUMPLE_CON_CF', 'CUMPLE_CON_NO3', 'CUMPLE_CON_AS', 'CUMPLE_CON_CD',
            'CUMPLE_CON_CR', 'CUMPLE_CON_HG', 'CUMPLE_CON_PB', 'CUMPLE_CON_MN',
            'CUMPLE CON FE']
     for var in vars:
         dicc = {'% Cumple':[], '% Verde': [], '% Amarillo': [], '% Rojo': []}
         for i in range(k):
             col = df final cols[df final cols['labels'] == i][var]
             #Calculamos los porcentajes de cumplimiento
             dicc['% Verde'].append((col[df_final_cols['SEMAFORO'] == 'Verde'].
      \rightarrowcount() / len(col))*100)
             dicc['% Amarillo'].append((col[df_final_cols['SEMAFORO'] == 'Amarillo'].
      \rightarrowcount() / len(col)) * 100)
             dicc['% Rojo'].append((col[df_final_cols['SEMAFORO'] == 'Rojo'].count()
      \rightarrow/ len(col)) * 100)
             dicc['% Cumple'].append((col[df_final_cols[var] == 'SI'].count() /__
      \rightarrowlen(col))*100)
         #Imprimimos los resultados
         print(var)
         display(pd.DataFrame(dicc, index = ['Cluster 1', 'Cluster 2']))
    CUMPLE_CON_ALC
                % Cumple
                            % Verde % Amarillo
                                                     % Rojo
    Cluster 1 93.806194 42.757243
                                       24.575425 32.667333
    Cluster 2 98.507463
                           8.955224
                                        1.492537 89.552239
    CUMPLE CON COND
                            % Verde % Amarillo
                % Cumple
                                                     % Rojo
    Cluster 1 87.512488 42.757243 24.575425 32.667333
    Cluster 2 94.029851
                           8.955224
                                       1.492537 89.552239
    CUMPLE_CON_SDT_ra
                            % Verde % Amarillo
                % Cumple
                                                     % Rojo
    Cluster 1
               93.006993 42.757243
                                       24.575425 32.667333
    Cluster 2 95.522388
                           8.955224
                                        1.492537 89.552239
    {\tt CUMPLE\_CON\_SDT\_salin}
                % Cumple
                            % Verde % Amarillo
                                                     % Rojo
    Cluster 1 93.006993 42.757243
                                       24.575425 32.667333
    Cluster 2 95.522388
                           8.955224
                                        1.492537 89.552239
    CUMPLE CON FLUO
```

	81.718282	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON_DUR							
Cluster 1	78.221778	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON	_CF						
	99.400599	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON	_NO3						
	92.007992	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON	_AS						
Cluster 1	87.712288	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON	_CD						
	99.900100	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON	_CR						
	98.501499	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON_HG							
	99.9001	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON	_PB						
Cluster 2	99.100899 95.522388	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	32.667333			
CUMPLE_CON_MN							
	_	42.757243	% Amarillo 24.575425 1.492537	-			

### CUMPLE\_CON\_FE

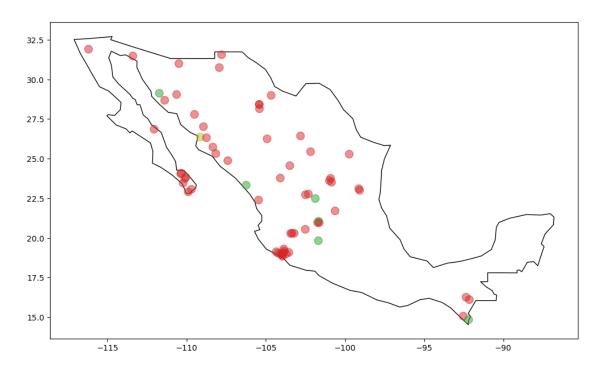
```
% Cumple % Verde % Amarillo % Rojo
Cluster 1 87.712288 42.757243 24.575425 32.667333
Cluster 2 80.597015 8.955224 1.492537 89.552239
```

De la tabla mostrada arriba se puede observar que la variable Coliforme Fecales es la que tiene el % de cumplimiento más bajo (18%) para el clúster #2, lo cual coincide con el análisis descriptivo realizado anteriormente.

Esto significa que el kmeans está agrupando en función de la contaminación debida a los Coliformes Fecales, por lo que los puntos graficados en el mapa serían aquellos pozos con mayor contaminación por coliformes.

Generemos nuevamente el mapa del clúster dos para hacer un análisis más detallado.

## []: <AxesSubplot: >



Ya sabemos que los puntos rojos se deben en su mayoría a valores altos de coliformes fecales, por

lo que conlleva a que estas aguas estén contaminadas. Del mapa anterior se puede destacar lo siguiente:

- Existen algunos cúmulos de puntos en los estados de Baja California Sur y Colima, lo cual significa que cuentan con varios números de pozos altamente contaminados por coliformes fecales. De hecho, si se compara con el mapa del clúster 1, se puede apreciar que de corregir esta situación estos dos estados tendrían la mayoría de sus pozos con una calidad entre excelente y aceptable.
- También se destacan varios pozos contaminados entre el sur de Sonora y el norte de Sinaloa. En comparación con el mapa del clúster 1, también se observa que la mayoría de los puntos rojos se debe a contaminación por coliformes.
- La parte sur de méxico prácticamente no tiene pozos contaminados, a excepción de aquellos que se encuentran por la zona de Chiapas.

Para un ejercicio futuro, podría ser interesante correlacionar esta información con datos demográficos de los estados mencionados.

### 3.2. Kmeans por coordenadas

```
from sklearn.cluster import KMeans
K = range(1,15)

wss = []

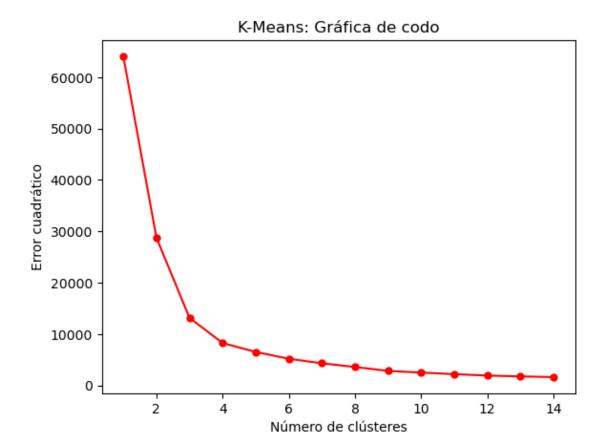
for k in K:
    kmeans = KMeans(n_clusters=k, init='k-means++')

kmeans = kmeans.fit(df_final_cols[['LONGITUD', 'LATITUD']])
    wss_iter = kmeans.inertia_
    wss.append(wss_iter)

centers = pd.DataFrame({'Clusters': K, 'WSS': wss})

import seaborn as sns
plt.plot(centers.Clusters, centers.WSS, 'ro-', markersize = 5)
plt.xlabel('Número de clústeres')
plt.ylabel('Error cuadrático')
plt.title('K-Means: Gráfica de codo')
```

[]: Text(0.5, 1.0, 'K-Means: Gráfica de codo')



```
[]: #Definimos el k óptimo
k = 4

geo_localizacion = df_final_cols[['LONGITUD', 'LATITUD']]

[]: #Entrenamos el modelo
kmeans = KMeans(n_clusters=k).fit(geo_localizacion)

#Buscamos las coordenadas de los centros
centroids = kmeans.cluster_centers_

#Asignamos los clústers a las observaciones
df_final_cols['labels'] = kmeans.labels_
C = kmeans.cluster_centers_.tolist()
C
```

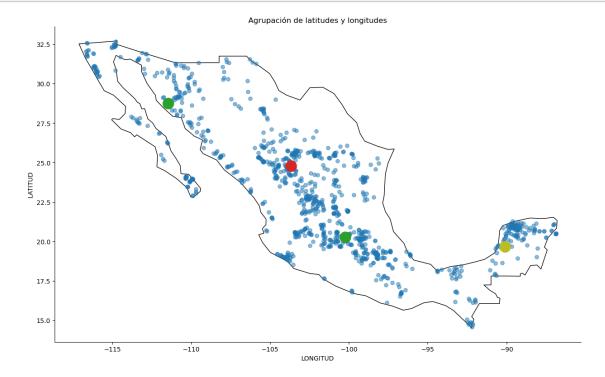
```
[-111.44537124271844, 28.73401659708738],
[-103.66051365634675, 24.76775789783282]]
```

Ahora generemos el dataframe que estaremos utilizando para graficar los centros. También definiremos una columna de "Semaforo", donde registraremos la moda de la calidad del agua para cada clúster.

```
[]:
                   Latitud Semaforo \
         Longitud
    0 -100.224094 20.255194
                                 Verde
    1 -90.092716 19.650263 Amarillo
    2 -111.445371 28.734017
                                 Verde
    3 -103.660514 24.767758
                                  Rojo
                                          Coordinates
    O POINT (-100.22409355702918 20.255194079575595)
                POINT (-90.09271577777778 19.6502625)
    1
        POINT (-111.44537124271844 28.73401659708738)
    2
        POINT (-103.66051365634675 24.76775789783282)
[]: geo_df = gpd.GeoDataFrame(df_centers, geometry="Coordinates")
```

Ahora procederemos a generar el gráfico

## plt.show()



Del gráfico anterior se puede observar que el centro de México es la zona con la mayor contaminación de agua, seguido de la zona sur, con una calidad aceptable. Las zonas con más pozos de agua potable se encuentran en la parte norte del país, y al sur del centro de México. Por último, veamos la cantidad de fuetnes de agua por cada clúster.

