

Предсказание обеспеченности посевов пшеницы макро- и микроэлементами по мульти- и гиперспектральным данным дистанционного зондирования с применением методов машинного обучения и пространственной кросс-валидации

А. А. Струев¹, Е. П. Митрофанов¹, В. П. Якушев¹,
В. М. Буре^{1,2}, О. А. Митрофанова¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет
Санкт-Петербург, 199034, Россия
E-mail: o.a.mitrofanova@spbu.ru

² Агрофизический научно-исследовательский институт
Санкт-Петербург, 195220, Россия

Традиционные методы диагностики обеспеченности растений макро- и микроэлементами трудоёмки, дороги и не позволяют получать непрерывные пространственные карты. Развитие технологий дистанционного зондирования открывает новые возможности для оперативного мониторинга посевов, однако для многих элементов, не имеющих характерных полос поглощения в видимом и ближнем инфракрасном диапазоне, задача остаётся нерешённой. Кроме того, многие существующие работы используют случайную кросс-валидацию, игнорируя пространственную автокорреляцию, что приводит к завышению точности моделей. В работе разработан и валидирован воспроизводимый подход на основе машинного обучения для предсказания концентрации 12 макро- и микроэлементов в надземной биомассе яровой пшеницы по мультиспектральным (5 каналов) и гиперспектральным (300 каналов, 390–1031 нм) данным. Построен набор признаков, включающий 44 широкополосных вегетационных индекса, оконные статистики и текстурные дескрипторы, характеризующие пространственную неоднородность полога. Для оценки моделей применена буферизованная кросс-валидация LOO (*англ.* leave-one-out), учитывающая индивидуальные радиусы пространственной автокорреляции. Использован отбор признаков mRMR (*англ.* Minimum Redundancy Maximum Relevance), байесовская оптимизация гиперпараметров и ансамблевые методы машинного обучения. Установлено, что при корректной пространственной валидации все 12 нутриентов мультиспектрального пайплайна имеют положительный коэффициент детерминации R^2 в диапазоне 0,11–0,46. Выявлено физическое разделение источников сигнала: для макроэлементов (N, S, Ca) ведущую роль играют вегетационные индексы (50–55 % важности), тогда как для микроэлементов и кобальта доминируют текстурные признаки (62–100 %). Сравнение с гиперспектром показало, что, несмотря на наличие 53–80 % предсказательной информации вне мультиспектрального диапазона, при равной выборке мультиспектр с текстурным каналом превосходит гиперспектр без текстур для 11 из 12 элементов, особенно для кобальта и нитратов. Случайная кросс-валидация завышает R^2 в среднем на 0,13, что подтверждает необходимость пространственно корректной оценки. Разработанный подход перспективен по построению карт распределения нутриентов (особенно по азоту, фосфору, калию), пригодных для дифференцированного внесения удобрений, а также для создания в дальнейшем гиперспектральных ортомозаик, интеграции текстур с гиперспектральными спектрами, кросс-полевой валидации и использования SWIR-диапазона для микроэлементов.

Ключевые слова: дистанционное зондирование, мультиспектральная съёмка, гиперспектральная съёмка, вегетационные индексы, текстурные признаки, машинное обучение, пространственная кросс-валидация, микроэлементы, яровая пшеница, точное земледелие

Одобрена к печати: 16.07.2026
DOI: 10.21046/2070-7401-2026-23-4-282-292

Введение

Питательный статус посевов пшеницы — один из ключевых факторов, определяющих урожайность и качество зерна. Традиционная диагностика дефицита элементов питания предполагает отбор и лабораторный анализ растительных проб. Несмотря на высокую точность,

такой подход имеет существенные ограничения: высокую стоимость, трудоёмкость, длительный цикл и локальность пространственного охвата — отдельные пробы не дают непрерывной картины распределения обеспеченности растений нутриентами по полю.

Развитие технологий дистанционного зондирования открыло принципиально новые возможности мониторинга посевов (Митрофанова и др., 2023; Mashori et al., 2026). Современные мультиспектральные камеры за несколько часов дают ортомозаику поля с разрешением 3–10 см/пиксель в 5–10 каналах от синего (450 нм) до ближнего инфракрасного (840–1000 нм). Камеры формата «5 каналов» (синий, зелёный, красный, красный край, ближний инфракрасный (ИК)) стали де-факто стандартом агрономических применений благодаря балансу информативности и стоимости (Maes, Steppe, 2019). Гиперспектральные камеры с push-broom-геометрией дают на порядок большее число узких каналов в более широком диапазоне, однако их применение для построения непрерывных карт всего поля ограничено отсутствием стандартных методик гиперспектральных ортомозаик и сложностями предобработки больших объёмов данных (Adão et al., 2017). В последние годы активно развиваются подходы на основе машинного и глубокого обучения для анализа гиперспектральных изображений сельскохозяйственных посевов, охватывающие задачи классификации культур, оценки питательного статуса, прогнозирования урожайности и мониторинга заболеваний (Митрофанова и др., 2025; Chancia et al., 2021; Xu et al., 2026).

Ряд элементов имеет характеристические полосы поглощения в диапазоне доступных сенсоров: азот — через хлорофилл-связанные механизмы и эффект красного края (Gitelson, Merzlyak, 1994), сера — через белковые комплексы. Это обосновывает возможность их дистанционной оценки (Berger et al., 2020), что также демонстрируют результаты наших исследований в рамках гранта РНФ. Однако предсказание содержания микроэлементов (Cu, Zn, Mn, Co, Fe), не имеющих собственных полос поглощения в видимом и ближнем ИК-диапазоне, остаётся открытой методологической проблемой. Большинство опубликованных работ сосредоточено на азоте (Li et al., 2023; Yu et al., 2022), а попытки одновременного профилирования всех элементов по спектроскопии дают слабые результаты для микроэлементов из-за отсутствия их специфических полос поглощения в VNIR-диапазоне (*англ.* visible and near-infrared) (Gill et al., 2024).

Дополнительная острая проблема — большинство работ применяют случайную кросс-валидацию, игнорируя пространственную автокорреляцию данных. Это приводит к систематическому завышению метрик качества — эффект, впервые строго описанный для крупномасштабных экологических моделей (Ploton et al., 2020) и слабо охарактеризованный количественно в задачах агрономического дистанционного зондирования.

Цель работы — разработать и валидировать с помощью пространственно корректной кросс-валидации подход к предсказанию концентрации 12 макро- и микроэлементов в надземной биомассе яровой пшеницы по мульти- и гиперспектральным данным дистанционного зондирования (ДДЗ), а также проанализировать вклад гиперспектральной информации в качество предсказания.

Объекты и методы

Исходные данные. Для исследования использовались параметры, измеренные в рамках одного сельскохозяйственного поля (Ленинградская обл.) на посевах яровой пшеницы в течение одного вегетационного сезона. Общий объём выборки составляет 200 наблюдений с известной концентрацией макро- и микроэлементов (12 нутриентов: N, P, K, Ca, Mg, S, NO₃, Fe, Mn, Cu, Zn, Co), полученных в нескольких фазах развития растений (кущение и выход в трубку). Кроме того, для каждой точки имеются исходные мозаики ДДЗ, полученные различными сенсорами. Мультиспектральные данные представлены снимками в пяти каналах (красный, зелёный, синий, ближний инфракрасный, дальний красный) с пространственным разрешением до 5 см/пиксель с двух камер зарубежного (*англ.* Micasense RedEdge) и отече-

ственного (*англ.* Pollux) производства. Гиперспектральные данные охватывают 300 каналов в интервале 390–1031 нм со спектральным разрешением около 2 нм; они получены в формате push-broom (последовательные строковые сканы) и не сведены в единую ортомозаику, что обуславливает их использование в точечном режиме. Все растры приведены к единой системе координат (проекция UTM (*англ.* Universal Transverse Mercator)).

Предобработка и построение датасета. На основе мозаик мультиспектральных снимков были построены ортофотопланы. С использованием 5 каналов сформирован дополнительный набор признаков трёх типов. Во-первых, вычислены 44 широкополосных вегетационных индексов (ВИ), отражающих физиологическое состояние посевов (Berger et al., 2020; Xue, Su, 2017):

- наиболее распространённые ВИ: NDVI (*англ.* Normalized Difference Vegetation Index), GNDVI (*англ.* Green NDVI), NDRE (*англ.* Normalized Difference Red-Edge), OSAVI (*англ.* Optimized Soil Adjusted Vegetation Index), EVI (*англ.* Enhanced Vegetation Index);
- специализированные ВИ для оценки нутриентов: CCCI (*англ.* Canopy Chlorophyll Content Index), CI_{re} (*англ.* Chlorophyll Index RedEdge), MCARI (*англ.* Modified Chlorophyll Absorption in Reflectance Index), отношение индексов MCARI/OSAVI;
- индексы антоцианов/фенологии: ARI (*англ.* Anthocyanin Reflectance Index), CRI700 (*англ.* Carotenoid Reflectance Index 700), PSRI (*англ.* Plant Senescence Reflectance Index), RTVI_{core} (*англ.* Red Edge Triangulated Vegetation Index);
- другие узкоспециализированные ВИ.

Во-вторых, для учёта внутрипиксельной неоднородности, обусловленной тем, что размер пикселя (5 см) меньше площади отдельного растения, в скользящем окне размера $w \times w$ пикселей рассчитаны статистические агрегаты (среднее, стандартное отклонение, медиана, перцентили, коэффициент вариации) для каждого канала. В-третьих, из тех же окон извлечены текстурные дескрипторы — матрицы совместной встречаемости GLCM (*англ.* Gray-Level Co-Occurrence Matrix), фильтры Габора и локальные бинарные шаблоны LBP (*англ.* Local Binary Patterns), — характеризующие пространственную неоднородность полога. Использование текстурных признаков имеет физическое обоснование: дефицит микроэлементов (Cu, Zn, Co) не даёт прямых спектральных сигналов в видимом и ближнем ИК-диапазоне, однако проявляется в мозаичном хлорозе, деформациях листьев и неравномерном росте, что регистрируется как изменение текстуры изображения.

Для гиперспектральных данных предобработка включала сглаживание фильтром Савицкого–Голея (Savitzky, Golay, 1964) с последующим применением четырёх вариантов нормализации: сырые значения (raw), стандартная нормальная переменная SNV (*англ.* standard normal variate), первая производная, а также первая производная после SNV. Из 300 каналов отбирался каждый пятый, что дало 60 спектральных каналов; после применения четырёх вариантов предобработки получено 240 спектральных признаков. Дополнительно для каждого наблюдения вычислены 24 гиперспектральных ВИ по узким полосам и коэффициенты непрерывного вейвлет-преобразования CWT (*англ.* continuous wavelet transform). Итоговое гиперспектральное признаковое пространство составило 264 признака. Важным ограничением стала невозможность вычисления текстурных дескрипторов для гиперспектральных данных в рамках точечного подхода, поскольку отсутствует ортомозаика, необходимая для построения скользящих окон.

Методы. Для выявления связей между спектральными признаками и концентрацией нутриентов применялся корреляционный анализ. Линейные и ранговые коэффициенты (Пирсона, Спирмена, Кендалла) дополнялись нелинейными метриками dCor (*англ.* distance correlation) и взаимной информацией. В отличие от коэффициента Пирсона, dCor $\in [0, 1]$ и равен нулю тогда и только тогда, когда переменные статистически независимы, что позволяет обнаруживать скрытые нелинейные зависимости даже при близком к нулю линейном коэффициенте. Условные взаимосвязи между нутриентами выявлялись с помощью графического метода LASSO (*англ.* Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) (Friedman et al., 2008), пространственная структура данных — с использованием глобального индекса Морана

и вариограммного анализа; для каждого нутриента по эмпирической вариограмме подбирались теоретическая модель (сферическая или экспоненциальная), что позволяло определить радиус пространственной автокорреляции, впоследствии применённый для построения буферов при валидации.

Для построения регрессионных моделей использовался широкий набор алгоритмов, охватывающий как линейные, так и нелинейные подходы: байесовский гребневой регрессор (*англ.* Bayesian Ridge), эластичную сеть (*англ.* ElasticNet), случайный лес (*англ.* Random Forest), экстремальные деревья ExtraTrees (*англ.* Extremely Randomized Trees), градиентный бустинг XGBoost (*англ.* eXtreme Gradient Boosting) и LightGBM (*англ.* Light Gradient Boosting Machine), а также метод опорных векторов с радиальным базисным ядром SVR (*англ.* Support Vector Regression). Выбор наилучшей модели для каждого нутриента осуществлялся автоматически: в ходе вложенной кросс-валидации с байесовской оптимизацией гиперпараметров (*англ.* Optuna). Для повышения устойчивости оценок и борьбы с переобучением внутри каждой обучающей подвыборки применялась регрессионно-ориентированная аугментация C-Mixup, выполняемая после выделения тестовой точки, что гарантирует отсутствие утечки данных.

Центральная методологическая проблема заключалась в пространственной автокорреляции полевых данных (Hengl et al., 2018; Ploton et al., 2020; Roberts et al., 2017): соседние пробы закономерно более схожи, чем удалённые, и при случайном разбиении выборки тестовые точки оказываются в пространственной близости к обучающим, что приводит к завышению метрик обобщающей способности. Для получения честных оценок вместо случайной кросс-валидации применялся метод buffered-LOO (*англ.* buffered leave-one-out). Для каждой тестовой точки из обучающего множества исключались все пробы, попавшие в радиус автокорреляции, определённый для данного нутриента по вариограмме (индивидуальные значения в диапазоне 30–100 м). Гиперпараметры моделей настраивались на оставшихся обучающих данных, что обеспечивает объективную оценку предсказательной силы. Для каждого нутриента строился 95%-й доверительный интервал для R^2 методом скорректированного и ускоренного бутстрапа BCa (*англ.* bias-corrected and accelerated); значимость моделей проверялась перестановочным тестом с 199 перестановками целевой переменной при сохранении пространственной структуры буферов.

Для снижения размерности признакового пространства и устранения избыточности использовался отбор признаков по критерию минимальной избыточности — максимальной релевантности mRMR (*англ.* minimum Redundancy Maximum Relevance) с фиксированным числом топ-50 признаков. В отличие от отбора по взаимной информации, mRMR штрафует за корреляцию между отбираемыми признаками, что позволяет равномерно распределить квоту по разнотипным источникам информации (вегетационные индексы, оконные статистики, текстурные дескрипторы), а не концентрироваться на кластере близких индексов. Все операции предобработки (нормировка, медианная импутация пропусков) и отбор признаков выполнялись строго внутри каждой обучающей подвыборки, что исключает любые формы утечки данных. Реализация всех алгоритмов выполнена на языке программирования Python 3.12 с использованием библиотек scikit-learn, xgboost, lightgbm, rasterio и geopandas.

Результаты и их обсуждение

Линейные и нелинейные зависимости. Для всех вегетационных индексов и 12 нутриентов вычислялись коэффициенты Пирсона $|r|$, Спирмена $|\rho|$ и dCor. Выявлено существенное расхождение между линейными и нелинейными мерами для ряда элементов. Наиболее показательна медь: $|r| = 0,034$ при dCor = 0,366 (прирост силы связи при учете нелинейности: $\Delta = +0,33$); аналогичная картина у цинка и калия. Прямое следствие: для Cu, Zn, K линейные методы (Ridge, ElasticNet, PLSR (*англ.* Partial Least Squares Regression)) заведомо неоптимальны, и требуются нелинейные алгоритмы — ансамбли деревьев. Графический метод LASSO выявил условные зависимости N—S (совместное включение в белковые комплексы), P—K (кооперативный транспорт через мембраны) и N—Zn (участие цинка в синтезе белков).

Предсказуемость нутриентов на мультиспектре. Итоговые метрики качества мультиспектрального пайплайна (снимки Pollux за одну дату; 5 каналов + оконные статистики + 44 ВИ + текстуры; отбор mRMR top-50; $n = 200$) приведены в *таблице*. При корректной пространственной валидации все 12 нутриентов имеют положительный R^2 : 2 элемента (17 %) демонстрируют хорошую предсказуемость ($R^2 \geq 0,4$), 6 (50 %) — умеренную ($0,2 \leq R^2 < 0,4$) и 4 (33 %) — слабую ($0 < R^2 < 0,2$); нутриентов с отсутствующим сигналом нет. Это превосходит результаты предшествующих пайплайнов с отбором по взаимной информации. Переход с отбора признаков на основе взаимной информации MI (*англ.* Mutual Information) на mRMR повысил R^2 для ведущих нутриентов (например, для N с 0,39 до 0,46) и позволил линейной модели Bayesian Ridge стать лучшей для 5 из 12 элементов, что объясняется устранением коллинеарности признаков.

Результаты кросс-валидации методом buffered-LOO для мультиспектральной выборки (Pollux за одну дату, $n = 200$, mRMR top-50)

Нутриент	Модель	R^2	Доверительный интервал 95 %	RPD
N	ExtraTrees	+0,463	[0,342; 0,560]	1,37
S	ExtraTrees	+0,408	[0,274; 0,516]	1,30
Ca	Random Forest	+0,370	[0,252; 0,478]	1,26
K	Bayesian Ridge	+0,305	[0,162; 0,422]	1,20
Co	Bayesian Ridge	+0,267	[0,039; 0,464]	1,17
Mg	Random Forest	+0,236	[0,112; 0,346]	1,14
Fe	ExtraTrees	+0,215	[0,079; 0,340]	1,13
P	Bayesian Ridge	+0,206	[0,048; 0,342]	1,12
NO ₃	Bayesian Ridge	+0,157	[-0,050; 0,268]	1,09
Zn	ExtraTrees	+0,133	[0,011; 0,248]	1,07
Cu	XGBoost	+0,124	[-0,013; 0,258]	1,07
Mn	Bayesian Ridge	+0,110	[-0,092; 0,295]	1,06

Примечание: RPD — метрика (*англ.* Ratio of Performance to Deviation).

Физическое разделение источников сигнала. Анализ важности признаков в лучших моделях выявил чёткое разделение нутриентов по ведущему каналу информации (*рис. 1*). Для макроэлементов (N, S, Ca) ведущими являются вегетационные индексы (50–55 % важности): азот напрямую связан с хлорофиллом через NDRE и Clre, сера — через биохимическую связь с N, кальций — через пигментные индексы. Для некоторых нутриентов доминируют текстурные дескрипторы (Co — 100 %, Mn — 81 %, NO₃ — 75 %, Zn и P — 74 %, Cu и K — 62 %). Дефицит этих элементов проявляется в очаговом хлорозе, деформациях листьев и неоднородном росте — паттернах, регистрируемых GLCM и LBP, но невидимых в усреднённых спектральных значениях. Кобальт — исключительный случай: ни один ВИ и ни одна оконная статистика не вошли в топ-50 признаков. Это, насколько известно авторам, первый опубликованный результат количественной оценки Co из мультиспектральных ДДЗ.

Эффект пространственной кросс-валидации и выбор сенсора. Индекс Морана значим ($p < 0,05$) для 10 из 12 нутриентов, что прямо подтверждает наличие пространственной автокорреляции: соседние пробы закономерно более похожи, чем удалённые. Соответственно, случайная кросс-валидация будет давать завышенные результаты, потому что тестовые точки могут оказаться рядом с обучающими, и модель «угадывает» их значения за счёт пространственной близости, а не за счёт реальной связи с признаками. Чтобы получить честную оценку, вместо случайного разбиения использовался метод buffered-LOO.

Сравнение двух подходов показало, что случайная 5-кратная кросс-валидация завышает R^2 в среднем на +0,13 единиц, а максимальное смещение наблюдается у марганца (+0,37):

при случайной валидации R^2 составляет около $-0,10$, тогда как buffered-LOO даёт $-0,47$, т.е. случайная схема полностью маскирует отсутствие обобщающей способности модели. Особенно драматична картина для следующих нутриентов: Mn, K, Mg, Co, NO_3 , Zn, где случайная валидация создаёт иллюзию наличия сигнала, который исчезает при пространственно корректной проверке. Результат эмпирически подтверждает выводы исследования (Ploton et al., 2020) для агрономических задач и количественно характеризует величину смещения для каждого из 12 элементов.

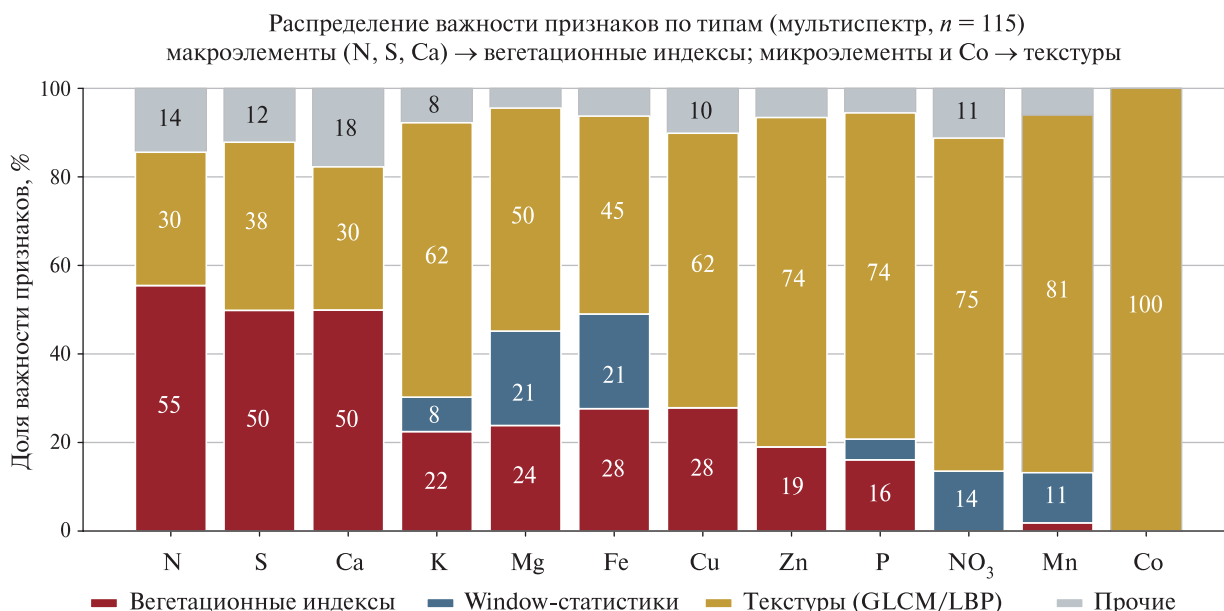


Рис. 1. Распределение важности признаков по типам для лучших моделей на мультиспектре

Помимо валидационной стратегии, на качество предсказания существенно влияет выбор аппаратуры. Размер скользящего окна для извлечения пространственных признаков подбирался эмпирически: оптимальным оказалось окно 7×7 пикселей (35×35 см при разрешении 5 см/пиксель), которое соответствует площади одного растения пшеницы и позволяет снизить случайный шум. Сравнение двух мультиспектральных камер, Pollux и MicaSense RedEdge-M, выявило неожиданный факт: Pollux превосходит MicaSense для 10 из 12 элементов по максимальной корреляции, при этом корреляция значений между камерами в одних и тех же точках составляет лишь $r = 0,08 \dots 0,26$. Это свидетельствует о принципиально различных спектральных характеристиках каналов (вероятно, из-за различий в центре и ширине канала красного края). Практический вывод: выбор сенсора влияет на качество предсказания не меньше, чем выбор алгоритма машинного обучения.

Гиперспектральный анализ и сравнение с мультиспектром. Из-за неполного покрытия поля полосами гиперспектральной камеры ($\sim 80\%$) эффективный размер выборки уменьшается до $n \approx 115$. При честной валидации значимый положительный сигнал сохраняют только N ($R^2 = 0,34$), S (0,38) и Ca (0,22); для четырёх нутриентов (Fe, Zn, P, Mn) mRMR не отобрал ни одного признака, и модель возвращает константные предсказания. Систематическое превышение dCor над коэффициентом Пирсона по гиперспектральным ВИ (в среднем +0,12, максимум +0,18 для Cu) подтверждает обоснованность нелинейных методов вместо традиционного для хемометрики PLSR (Wold et al., 2001). Анализ важности длин волн показал, что 53–80 % (в среднем 67 %) предсказательной информации лежит вне диапазона 450–842 нм, доступного типичной 5-канальной мультиспектральной камере; SWT-вейвлеты дают существенный вклад только для нитратов (20 %). Доминирование области 850–1000 нм согласуется с физикой растительности: форма красного края и ближний ИК-диапазон несут основную информацию о структурных и физиологических изменениях полого.

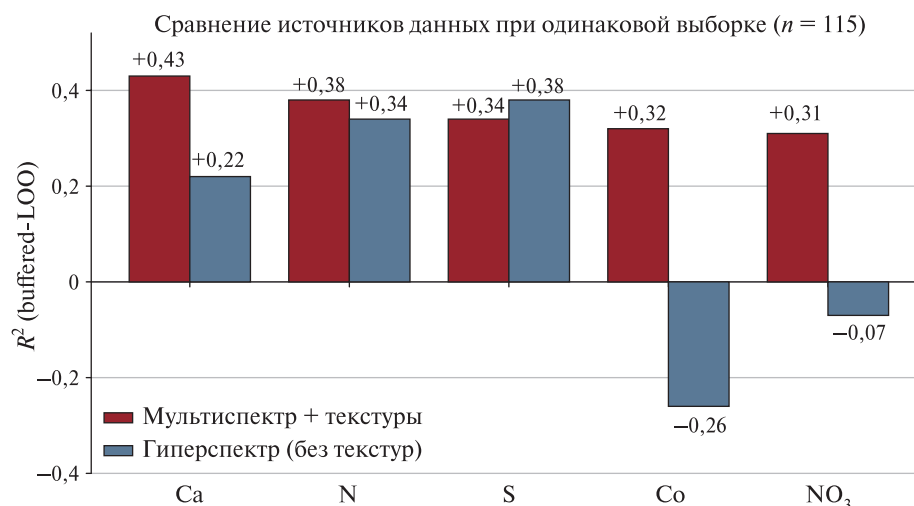


Рис. 2. Сравнение R^2 при равной выборке ($n = 115$) для мультиспектра с текстурами и гиперспектра без текстур

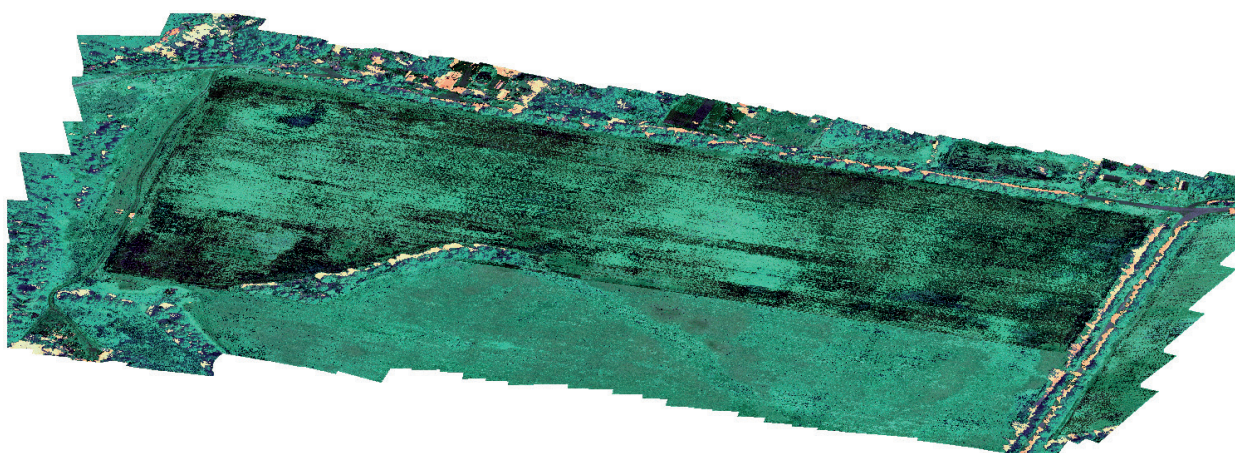


Рис. 3. Пример композитной карты предсказанной концентрации микроэлементов

Для корректного сравнения платформ мультиспектральный пайплайн был прогнан на тех же 115 точках, что и гиперспектральный (рис. 2). Результат носит решительный характер: при равной выборке мультиспектр превосходит гиперспектр для 11 из 12 нутриентов; только для серы гиперспектр слегка лучше (в пределах доверительных интервалов). Наибольший выигрыш мультиспектра наблюдается именно у следующих нутриентов: Co ($\Delta R^2 = +0,58$ — разность коэффициентов детерминации мультиспектра и гиперспектра), NO₃ ($\Delta R^2 = +0,38$), Mn, P, K ($\Delta R^2 = +0,12...0,15$). Результат может показаться парадоксальным: гиперспектр имеет на порядок больше спектральной информации и охватывает диапазоны, недоступные мультиспектру. Тем не менее на практике он проигрывает наиболее заметно именно на тех нутриентах, где у мультиспектра доминируют текстурные признаки. Причина в том, что текстуры GLCM/Gabor/LBP в точечном режиме обучения на гиперспектре принципиально недоступны: их вычисление требует растровой ортомозаики, которой для сенсора Pika L (гиперспектральной камеры) не существует. Узкие гиперспектральные каналы содержат больше физической информации о химии листьев, однако для большинства нутриентов эта спектральная информация оказывается менее значимой, чем пространственная информация о морфологии полога.

Попиксельное картирование нутриентов. После обучения моделей решается задача инференса — построения пространственно непрерывных карт концентрации в каждом пикселе.

Ключевое требование корректности — идентичность признаков при обучении и инференсе, обеспечиваемая единой функцией извлечения признаков из патча $w \times w$ пикселей. Ортомозаика обрабатывается тайлами 512×512 с перекрытием; выходом представляется 12-канальный GeoTIFF концентрации нутриентов с сохранением геопространственной привязки и карта эпистемической неопределённости (стандартное отклонение по ансамблю деревьев). Пример итоговой композитной карты для поля (съемка камерой Pollux за один день) представлен на рис. 3: ложноцветное RGB-сочетание трёх каналов 12-слойного растра наглядно демонстрирует крупномасштабные градиенты вдоль полос посевов и мелко-масштабную текстуру, которая является доминирующим сигналом для микроэлементов. Карты напрямую открываются в QGIS/ArcGIS и пригодны для формирования рекомендаций по дифференцированному внесению удобрений. Для гиперспектра, ввиду отсутствия ортомозаики, предложена архитектура картирования по отдельным push-broom-полосам с последующим объединением результатов; её полноценное тестирование требует существенных вычислительных ресурсов и становится перспективой развития.

Заключение

Разработан и валидирован воспроизводимый подход с использованием машинного обучения для оценки концентрации 12 макро- и микроэлементов в надземной биомассе яровой пшеницы по мульти- и гиперспектральным ДДЗ. В ходе аудита методологии выявлен эффект *augmentation leakage*: применение аугментации C-Mixup до разбиения выборки завышает R^2 в среднем на 0,65. После устранения этой ошибки и перехода к строгой пространственной валидации (buffered-LOO) все 12 нутриентов мультиспектрального пайплайна получили положительный R^2 в диапазоне 0,11–0,46. Хорошую предсказуемость ($R^2 \geq 0,4$) показывают азот и сера. Замена отбора по взаимной информации на mRMR повысила качество моделей за счёт устранения избыточности коррелирующих ВИ.

Установлено физическое разделение нутриентов по ведущему каналу информации: для макроэлементов (N, S, Ca) доминируют ВИ (50–55 % важности), для микроэлементов и кобальта — текстурные дескрипторы пространственной неоднородности (62–100 %). Сравнение случайной и буферизованной кросс-валидации показало, что случайная завышает R^2 в среднем на +0,13 (максимум +0,37 у Mn), что подтверждает необходимость пространственно корректной оценки для агрономических задач. Выбор сенсора также существенно влияет на результат: камера Pollux превосходит MicaSense RedEdge-M для 10 из 12 нутриентов, а корреляция между ними в одних точках составляет лишь $r = 0,08 \dots 0,26$.

Анализ гиперспектральных данных выявил, что 53–80 % (в среднем 67 %) предсказательной информации лежит вне диапазона типичного мультиспектра (450–842 нм). Однако при равной выборке мультиспектральный пайплайн с текстурными признаками превосходит гиперспектр без текстур для 11 из 12 нутриентов, особенно для Co ($\Delta R^2 = +0,58$) и NO_3 ($\Delta R^2 = +0,38$). Это объясняется недоступностью текстурных признаков в точечном режиме обучения на гиперспектре из-за отсутствия ортомозаики. Таким образом, для прикладного агрономического мониторинга предпочтительным становится мультиспектр с пространственными признаками, обеспечивающий практическую применимость и воспроизводимость.

Разработанный пайплайн включает попиксельное картирование нутриентов с формированием 12-канальных GeoTIFF и карт неопределённости; предложена архитектура для гиперспектральных полос при отсутствии ортомозаики. Перспективы дальнейших исследований — создание методик гиперспектральных ортомозаик, интеграция текстур с гиперспектральными спектрами, кросс-полевая валидация и использование SWIR-диапазона (англ. short wave infrared) для микроэлементов.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 24-16-00203, <https://rscf.ru/project/24-16-00203/>.

Литература

1. Митрофанова О. А., Митрофанов Е. П., Блеканов И. С., Молин А. Е. Специализированный датасет мультиспектральных аэрофотоснимков для решения задач точного земледелия с применением методов искусственного интеллекта // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2023. Т. 20. № 6. С. 67–79. <https://doi.org/10.21046/2070-7401-2023-20-6-67-79>.
2. Митрофанова О. А., Митрофанов Е. П., Буре В. М. Анализ гиперспектральных данных дистанционного зондирования и урожайности пшеницы для задачи прогнозирования // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2025. Т. 22. № 1. С. 93–105. <https://doi.org/10.21046/2070-7401-2025-22-1-93-105>.
3. Adão T., Hruška J., Pádua L. et al. Hyperspectral imaging: A review on UAV-based sensors, data processing and applications for agriculture and forestry // Remote Sensing. 2017. V. 9. No. 11. Article 1110. <https://doi.org/10.3390/rs9111110>.
4. Berger K., Verrelst J., Féret J.-B. et al. Crop nitrogen monitoring: Recent progress and principal developments in the context of imaging spectroscopy missions // Remote Sensing of Environment. 2020. V. 242. Article 111758. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2020.111758>.
5. Chancia R., Bates T., Heuvel J. V., Aardt J. Assessing grapevine nutrient status from unmanned aerial system (UAS) hyperspectral imagery // Remote Sensing. 2021. V. 13. No. 21. Article 4489. <https://doi.org/10.3390/rs13214489>.
6. Friedman J., Hastie T., Tibshirani R. Sparse inverse covariance estimation with the graphical lasso // Biostatistics. 2008. V. 9. No. 3. P. 432–441. <https://doi.org/10.1093/biostatistics/kxm045>.
7. Gill A. K., Gaur S., Sneller C., Drewry D. T. Utilizing VSWIR spectroscopy for macronutrient and micronutrient profiling in winter wheat // Frontiers in Plant Science. 2024. V. 15. Article 1426077. <https://doi.org/10.3389/fpls.2024.1426077>.
8. Gitelson A., Merzlyak M. N. Quantitative estimation of chlorophyll-*a* using reflectance spectra // J. Photochemistry and Photobiology B: Biology. 1994. V. 22. No. 3. P. 247–252. [https://doi.org/10.1016/1011-1344\(93\)006963-4](https://doi.org/10.1016/1011-1344(93)006963-4).
9. Hengl T., Nussbaum M., Wright M. N. et al. Random Forest as a generic framework for predictive modeling of spatial and spatio-temporal variables // PeerJ. 2018. V. 6. Article e26693v3. <https://doi.org/10.7287/peerj.preprints.26693v3>.
10. Li Z., Zhou X., Cheng Q. et al. A machine-learning model based on the fusion of spectral and textural features from UAV multi-sensors to analyse the total nitrogen content in winter wheat // Remote Sensing. 2023. V. 15. No. 8. Article 2152. <https://doi.org/10.3390/rs15082152>.
11. Maes W. H., Steppe K. Perspectives for remote sensing with unmanned aerial vehicles in precision agriculture // Trends in Plant Science. 2019. V. 24. No. 2. P. 152–164. <https://doi.org/10.1016/j.tplants.2018.11.007>.
12. Mashori A. S., Li F., Aman M. et al. Remote sensing through UAVs for precision agriculture: Applications, technical foundations, current barriers, and future opportunities // Smart Agricultural Technology. 2026. V. 14. Article 102074. <https://doi.org/10.1016/j.atech.2026.102074>.
13. Ploton P., Mortier F., Réjou-Méchain M. et al. Spatial validation reveals poor predictive performance of large-scale ecological mapping models // Nature Communications. 2020. V. 11. Article 4540. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18321-y>.
14. Roberts D. R., Bahn V., Ciuti S. et al. Cross-validation strategies for data with temporal, spatial, hierarchical, or phylogenetic structure // Ecography. 2017. V. 40. No. 8. P. 913–929. <https://doi.org/10.1111/ecog.02881>.
15. Savitzky A., Golay M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures // Analytical Chemistry. 1964. V. 36. No. 8. P. 1627–1639. <https://doi.org/10.1021/ac60214a047>.
16. Wold S., Sjöström M., Eriksson L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. 2001. V. 58. No. 2. P. 109–130. [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(01\)00155-1](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(01)00155-1).
17. Xu L., Chen L., Luo Q. et al. Leveraging UAV hyperspectral imaging for crop physiology and biochemistry: A comprehensive review of feature extraction and selection methods // Plant Phenomics. 2026. V. 8. Iss. 1. Article 100141. <https://doi.org/10.1016/j.plaphe.2025.100141>.
18. Xue J., Su B. Significant remote sensing vegetation indices: A review of developments and applications // J. Sensors. 2017. V. 2017. Article 1353691. <https://doi.org/10.1155/2017/1353691>.
19. Yu J., Wang J., Leblon B., Song Y. Nitrogen estimation for wheat using UAV-based and satellite multispectral imagery, topographic metrics, leaf area index, plant height, soil moisture, and machine learning methods // Nitrogen. 2022. V. 3. No. 1. P. 1–25. <https://doi.org/10.3390/nitrogen3010001>.

Predicting wheat crops nutrient status using multispectral and hyperspectral remote sensing data, machine learning and spatial cross-validation

A. A. Struev¹, E. P. Mitrofanov¹, V. P. Yakushev¹, V. M. Bure^{1,2}, O. A. Mitrofanova¹

¹ Saint Petersburg State University, Saint Petersburg 199034, Russia
E-mail: o.a.mitrofanova@spbu.ru

² Agrophysical Research Institute, Saint Petersburg 195220, Russia

Traditional methods for diagnosing the supply of plants with macro- and micronutrients are labor-intensive, expensive, and do not allow obtaining continuous spatial maps. The development of remote sensing technologies opens new opportunities for operational crop monitoring; however, for many elements that lack characteristic absorption bands in the visible and near-infrared ranges, the problem remains unsolved. Moreover, many existing studies use random cross-validation, ignoring spatial autocorrelation, which leads to overestimation of model accuracy. In this work, a reproducible machine learning approach is developed and validated for predicting the concentrations of 12 macro- and micronutrients in the aboveground biomass of spring wheat using multispectral (5 bands) and hyperspectral (300 bands, 390–1031 nm) data. A feature set was constructed comprising 44 broadband vegetation indices, window-based statistics, and textural descriptors characterizing the spatial heterogeneity of the canopy. For model evaluation, buffered leave-one-out cross-validation was applied, accounting for individual spatial autocorrelation radii. The approach employed mRMR feature selection, Bayesian hyperparameter optimization, and ensemble machine learning methods. It was found that under correct spatial validation all 12 nutrients in the multispectral pipeline yield positive coefficients of determination R^2 in the range of 0.11–0.46. A physical separation of signal sources was revealed: for macronutrients (N, S, Ca), vegetation indices played the leading role (50–55 % importance), whereas for micronutrients and cobalt, textural features dominated (62–100 %). Comparison with the hyperspectral data showed that, despite 53–80 % of predictive information lying outside the multispectral range, at equal sample size the multispectral pipeline with texture channel outperforms the hyperspectral one without textures for 11 out of 12 elements, especially for cobalt and nitrates. Random cross-validation overestimates R^2 by 0.13 on average, confirming the necessity of spatially-correct evaluation. The developed approach is promising for constructing nutrient distribution maps (especially for nitrogen, phosphorus, and potassium) suitable for variable-rate fertilization, as well as for future development of hyperspectral orthomosaics, integration of textures with hyperspectral spectra, cross-field validation, and use of the SWIR range for micronutrients.

Keywords: remote sensing, multispectral imagery, hyperspectral imagery, vegetation indices, textural features, machine learning, spatial cross-validation, micronutrients, spring wheat, precision agriculture

Accepted: 16.07.2026

DOI: 10.21046/2070-7401-2026-23-4-282-292

References

1. Mitrofanova O. A., Mitrofanov E. P., Blekanov I. S., Molin A. E., Specialized dataset of multispectral aerophotos for solving precision farming problems using artificial intelligence methods, *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa*, 2023, V. 20, No. 6, pp. 67–79 (in Russian), <https://doi.org/10.21046/2070-7401-2023-20-6-67-79>.
2. Mitrofanova O. A., Mitrofanov E. P., Bure V. M., Analysis of hyperspectral remote sensing data and wheat yield for the forecasting task, *Sovremennye problemy distantsionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa*, 2025, V. 22, No. 1, pp. 93–105 (in Russian), <https://doi.org/10.21046/2070-7401-2025-22-1-93-105>.
3. Adão T., Hruška J., Pádua L. et al., Hyperspectral imaging: A review on UAV-based sensors, data processing and applications for agriculture and forestry, *Remote Sensing*, 2017, V. 9, No. 11, Article 1110, <https://doi.org/10.3390/rs9111110>.
4. Berger K., Verrelst J., Féret J.-B. et al., Crop nitrogen monitoring: Recent progress and principal developments in the context of imaging spectroscopy missions, *Remote Sensing of Environment*, 2020, V. 242, Article 111758, <https://doi.org/10.1016/j.rse.2020.111758>.

5. Chancia R., Bates T., Heuvel J. V., Aardt J., Assessing grapevine nutrient status from unmanned aerial system (UAS) hyperspectral imagery, *Remote Sensing*, 2021, V. 13, No. 21, Article 4489, <https://doi.org/10.3390/rs13214489>.
6. Friedman J., Hastie T., Tibshirani R., Sparse inverse covariance estimation with the graphical lasso, *Biostatistics*, 2008, V. 9, No. 3, pp. 432–441, <https://doi.org/10.1093/biostatistics/kxm045>.
7. Gill A. K., Gaur S., Sneller C., Drewry D. T., Utilizing VSWIR spectroscopy for macronutrient and micro-nutrient profiling in winter wheat, *Frontiers in Plant Science*, 2024, V. 15, Article 1426077, <https://doi.org/10.3389/fpls.2024.1426077>.
8. Gitelson A., Merzlyak M. N., Quantitative estimation of chlorophyll-*a* using reflectance spectra, *J. Photochemistry and Photobiology B: Biology*, 1994, V. 22, No. 3, pp. 247–252, [https://doi.org/10.1016/1011-1344\(93\)006963-4](https://doi.org/10.1016/1011-1344(93)006963-4).
9. Hengl T., Nussbaum M., Wright M. N. et al., Random Forest as a generic framework for predictive modeling of spatial and spatio-temporal variables, *PeerJ*, 2018, V. 6, Article e26693v3, <https://doi.org/10.7287/peerj.preprints.26693v3>.
10. Li Z., Zhou X., Cheng Q. et al., A machine-learning model based on the fusion of spectral and textural features from UAV multi-sensors to analyse the total nitrogen content in winter wheat, *Remote Sensing*, 2023, V. 15, No. 8, Article 2152, <https://doi.org/10.3390/rs15082152>.
11. Maes W. H., Steppe K., Perspectives for remote sensing with unmanned aerial vehicles in precision agriculture, *Trends in Plant Science*, 2019, V. 24, No. 2, pp. 152–164, <https://doi.org/10.1016/j.tplants.2018.11.007>.
12. Mashori A. S., Li F., Aman M. et al., Remote Sensing through UAVs for precision agriculture: Applications, technical foundations, current barriers, and future opportunities, *Smart Agricultural Technology*, 2026, V. 14, Article 102074, <https://doi.org/10.1016/j.atech.2026.102074>.
13. Ploton P., Mortier F., Réjou-Méchain M. et al., Spatial validation reveals poor predictive performance of large-scale ecological mapping models, *Nature Communications*, 2020, V. 11, Article 4540, <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18321-y>.
14. Roberts D. R., Bahn V., Ciuti S. et al., Cross-validation strategies for data with temporal, spatial, hierarchical, or phylogenetic structure, *Ecography*, 2017, V. 40, No. 8, pp. 913–929, <https://doi.org/10.1111/ecog.02881>.
15. Savitzky A., Golay M. J. E., Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures, *Analytical Chemistry*, 1964, V. 36, No. 8, pp. 1627–1639, <https://doi.org/10.1021/ac60214a047>.
16. Wold S., Sjöström M., Eriksson L., PLS-regression: a basic tool of chemometrics, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2001, V. 58, No. 2, pp. 109–130, [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(01\)00155-1](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(01)00155-1).
17. Xu L., Chen L., Luo Q. et al., Leveraging UAV hyperspectral imaging for crop physiology and biochemistry: A comprehensive review of feature extraction and selection methods, *Plant Phenomics*, 2026, V. 8, Iss. 1, Article 100141, <https://doi.org/10.1016/j.plaphe.2025.100141>.
18. Xue J., Su B., Significant remote sensing vegetation indices: A review of developments and applications, *J. Sensors*, 2017, V. 2017, Article 1353691, <https://doi.org/10.1155/2017/1353691>.
19. Yu J., Wang J., Leblon B., Song Y., Nitrogen estimation for wheat using UAV-based and satellite multi-spectral imagery, topographic metrics, leaf area index, plant height, soil moisture, and machine learning methods, *Nitrogen*, 2022, V. 3, No. 1, pp. 1–25, <https://doi.org/10.3390/nitrogen3010001>.