

基于机器学习的人体指甲光谱模式识别及溯源分析

侯伟¹, 王继芬^{1*}, 刘怡然²

¹中国人民公安大学侦查学院, 北京 100038;

²中国人民公安大学公安管理学院, 北京 100038

摘要 物证的溯源分析一直是法庭科学领域的一大难点,在刑事案件侦查中发挥着重要作用。提出了一种衰减全反射-傅里叶变换红外光谱(ATR-FTIR)结合机器学习相关方法对人体指甲样本进行检验和溯源分析的新方法。采集了来自我国7大地区18个省市共计195名志愿者十指指甲样本的ATR-FTIR图,经预处理后使用主成分分析(PCA)和因子分析(FA)两种方法进行降维处理,随后采用多层感知器(MLP)、径向基函数(RBF)、决策树(DT)以及支持向量机(SVM)模型开展分类识别。实验结果表明,PCA和FA两种降维方法在后续建模分析方面差别不大;MLP的分类效果优于RBF;基于CHAID算法的主成分分析和决策树(PCA-DT)模型训练集和测试集分类识别率分别可达91.0%和92.0%,优于穷举式CHAID、CRT和QUEST算法;基于多项式核函数的主成分分析和支持向量机(PCA-SVM)模型能够实现7大地区和华北5省市指甲样本的完全区分,分类效果优于RBF、Sigmoid和线性核函数。因此,采用ATR-FTIR技术结合PCA-SVM模型能够实现不同地域指甲样本的准确区分,为指甲物证的溯源分析提供了一种新的方法与思路。

关键词 光谱学; 指甲; 化学计量学; 溯源分析

中图分类号 O433.4

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP202259.1830002

Spectral Pattern Recognition and Traceability Analysis of Human Fingernail Based on Machine Learning

Hou Wei¹, Wang Jifen^{1*}, Liu Yiran²

¹School of Investigation, People's Public Security University of China, Beijing 100038, China;

²School of Police Administration, People's Public Security University of China, Beijing 100038, China

Abstract The traceability analysis of material evidence has always been a tough area of forensic expertise, which is crucial for criminal investigations. This study proposes a new method for the detection and traceability analysis of human fingernail samples using attenuated total reflection Fourier transformed infrared spectroscopy (ATR-FTIR) combined with machine learning related methods. The ATR-FTIR of fingernails from 195 volunteers were collected. These volunteers came from 18 provinces located in the 7 regions of China. The dimensionality of the original spectral data was reduced via principal component analysis (PCA) and factor analysis (FA) after preprocessing. Multilayer perceptron (MLP), radial basis function (RBF), decision tree (DT), and support vector machine (SVM) models were used for classification and recognition. The experimental results show that in the subsequent modeling analysis, there is little difference between PCA and FA. The classification effect of the MLP is better than that of the RBF. The classification accuracy of the training set and test set of the PCA-DT model based on the CHAID algorithm can reach 91.0% and 92.0%, respectively, which are better than those of the exhaustive CHAID, CRT, and QUEST algorithms. PCA-SVM model based on the polynomial kernel function can fully distinguish fingernail samples from seven regions and five provinces in North China. Its classification accuracy is better than those of RBF, Sigmoid, and linear kernel functions. Therefore, the ATR-FTIR technology combined with the PCA-SVM model can accurately classify the fingernail samples from different regions. This study establishes a new method reference for analyzing the traceability of fingernail evidence.

Key words spectroscopy; fingernail; chemometrics; traceability analysis

收稿日期: 2021-05-15; 修回日期: 2021-06-29; 录用日期: 2021-07-27

基金项目: 基本科研业务费重点项目(2021JKF208)

通信作者: *wangjifen58@126.com

1 引言

在法庭科学领域,指甲作为一种新型生物信息载体,具有易收集储藏、不怕污染、检验窗口时限长等优点,正越来越多地被应用于个体认定及药物检测分析,是当前该领域的一大研究热点^[1]。目前对于指甲样本的检测方法较为丰富,如气相色谱质谱联用技术^[2]、液相色谱质谱联用技术^[3]、感应耦合等离子质谱技术^[4]和稳定同位素分析技术^[5]等,这些方法能够较好地实现指甲样本不同方面的检验分析,但不足之处在于分析过程中都对样本造成了不可逆的损坏,难以实现物证的保存和复检。而光谱检验技术可以实现对指甲样本的快速无损分析,能够满足公安机关对于物证保存的相关要求,其在该领域的应用潜力值得被深入挖掘。

目前国内外采用光谱技术对指甲进行检验的研究相对较少,主要集中在疾病监测控制等方面,如 Beattie 等^[6]采用拉曼光谱技术对数百位英国女性指甲进行了检测和统计,相关结果可以反映某人罹患骨质疏松病的风险等级;汪红艳等^[7]采用傅里叶变换红外光谱结合化学计量学方法对正常人及食管癌患者的指甲样本进行了分析对比,结果显示两类人群的指甲谱图具有一定的差别,表明光谱法在食管癌的快速诊断方面具有较好的应用前景。除上述研究以外,指甲的光谱检验技术在法庭科学领域还具有其他方面的应用价值。由于所处气候环境的差异,不同人指甲中的含水量、蛋白质及微量元素含量均有所区别^[8-9],这就使得指甲的光谱检验技术在进行个体识别乃至溯源分析方面具备一定的可行性,近年来国外已开展了部分研究,如采用光谱技术结合化学计量学对指甲样本所属性别进行判别,取得了较为良好的效果^[10-11],但是目前尚缺乏有关人体指甲物证地域溯源分析方面的相关报道,因而具有较高的研究价值与意义。

本文以全国不同省份居民指甲样本为研究对象,采用机器学习的相关方法对指甲样本的衰减全反射傅里叶变换红外光谱(ATR-FTIR)谱图数据进行分类建模分析,以期构建人体指甲样本的分析分类模型,实现不同指甲样本所属行为人的地域来源判别,为生物组织的溯源分析研究提供一种快速、无损的检验方法。

2 实验

2.1 实验样本与仪器

样本:采集了来自我国华北(北京市、天津市、河北省、山西省、内蒙古自治区)、东北(辽宁省)、华东(上海市、江苏省、江西省、山东省、浙江省)、华中(河南省)、华南(广东省、广西壮族自治区)、西南(四川省、云南省)和西北(陕西省、甘肃省)7大地区共计195位志愿者的十指指甲样本,其中男性85人,女性110人,样本采集前所有志愿者均签署知情同意书。

仪器:Nicolet 5700 型傅里叶变换红外光谱仪

(Thermo Fisher Scientific 公司),衰减全反射附件(Thermo Fisher Scientific 公司)。

2.2 谱图采集

将指甲样本的外侧紧贴金刚石晶体并压实,分别采集每份指甲样品的傅里叶变换红外光谱图,光谱采集范围为 4000 cm^{-1} 至 650 cm^{-1} ,分辨率为 4 cm^{-1} ,样本采集前首先排除环境背景干扰,每次光谱采集过程中仪器自动扫描64次,全部扫描完成后得出一张较好的谱图并保存。每个样本连续进行3次谱图采集,选择其中较好的谱图作为该指甲样本最终的傅里叶变换红外光谱图。

2.3 光谱数据预处理

首先利用 OMNIC 光谱分析软件对每份指甲样本的傅里叶变换红外光谱进行自动基线校正、多元散射校正和纵坐标归一化,随后进行多项式(Savitzky-Golay, S-G)平滑滤波操作(3阶平滑多项式,平滑点数为7)以消除背景噪声影响。将处理好的谱图导出保存为数值形式,采用 Zscore 标准化对谱图原始数据进行规范化处理,有利于光谱数据的综合评测分析。

采用主成分分析(PCA)和因子分析(FA)两种方法分别对原始光谱数据进行降维处理,并将特征变量用作后续建模分析。上述降维过程由 SIMAC 14.1 和 SPSS 26.0 两种软件处理完成。

2.4 多元建模分析

2.4.1 多层感知器

多层感知器(MLP)神经网络是一种包含输入层、单个或多个隐藏层以及输出层结构的神经网络,通过数个特征值的链接进行线性或非线性的组合,最终实现样本数据的判别分类等目的^[12]。在 MLP 神经网络中,隐藏层的作用是采用某种激活函数将输入映射到输出,常用 Sigmoid 函数或 Tanh 函数^[13],在此次实验中选择 Tanh 函数作为隐藏层的激活函数,其表达式为

$$\text{Tanh } x = \frac{\sinh x}{\cosh x} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (1)$$

在建模过程中选择隐藏层中的最小和最大单元数分别为1和50,初始 Lambda 值为0.0000005,初始 Sigma 值为0.0005,区间偏移量为 ± 0.5 。

2.4.2 径向基函数

径向基函数(RBF)神经网络是一种能够以任意精度逼近任意连续非线性网络的前馈型神经网络,其结构与 MLP 相似,区别在于 RBF 仅包含一个隐藏层。其核心思想是将低维线性不可分的数据映射到高维空间,使其在高维空间线性可分^[14]。RBF 的隐藏层常用高斯函数,其表达式为

$$f(\|x - x_c\|) = \exp\left\{-\|x - x_c\|^2 / (2\sigma^2)\right\} \quad (2)$$

式中: x 是空间中的任意一点; x_c 为核函数中心; $f(\| \cdot \|)$ 是欧氏范数; σ 为函数的宽度参数,直接控制函数的径

向作用范围^[15]。

2.4.3 决策树

决策树(DT)是一种有监督的机器学习方法,其本质是由训练数据集估计条件概率模型,通过多个树节点的判别获取已知样本的种类信息,并以此预测未知样本的种类^[16]。DT包含有多种算法,常见的有卡方自动交互检测(CHAD)、穷举式CHAD、分类回归树(CRT)、快速无偏有效统计树(QUEST)等,不同算法对于数据的处理和分析均有所不同,在建模过程中分别对以上4种算法的分类识别率进行考察。

2.4.4 支持向量机

支持向量机(SVM)是一种有监督学习的二元广义线性分类器,通过构建最佳超平面将两类数据进行区分。对于非线性数据,SVM模型通过构建核函数在低维空间对数据进行运算,并将分类结果映射至高维

空间,常见的核函数类型主要有RBF核函数、多项式核函数、Sigmoid核函数和线性核函数。这一过程不仅避免了运算的复杂度,同时还实现了非线性数据在高维空间内的有效区分,因此SVM模型是一种较为强大的多元统计分析方法^[17-18]。

以上多元统计方法由数据分析软件SPSS 26.0处理完成。

3 结果与分析

3.1 指甲样本红外谱图分析

对同一份指甲样本的5个不同部位进行光谱信息采集以确定实验的重复性,谱图信息结果如图1(a)所示,图中A1~A5分别表示同一指甲样本5个不同的采集部位。结果表明同一指甲样本不同部位的红外谱图并无明显区别,采集区域的变化不会影响实验的可重复性。

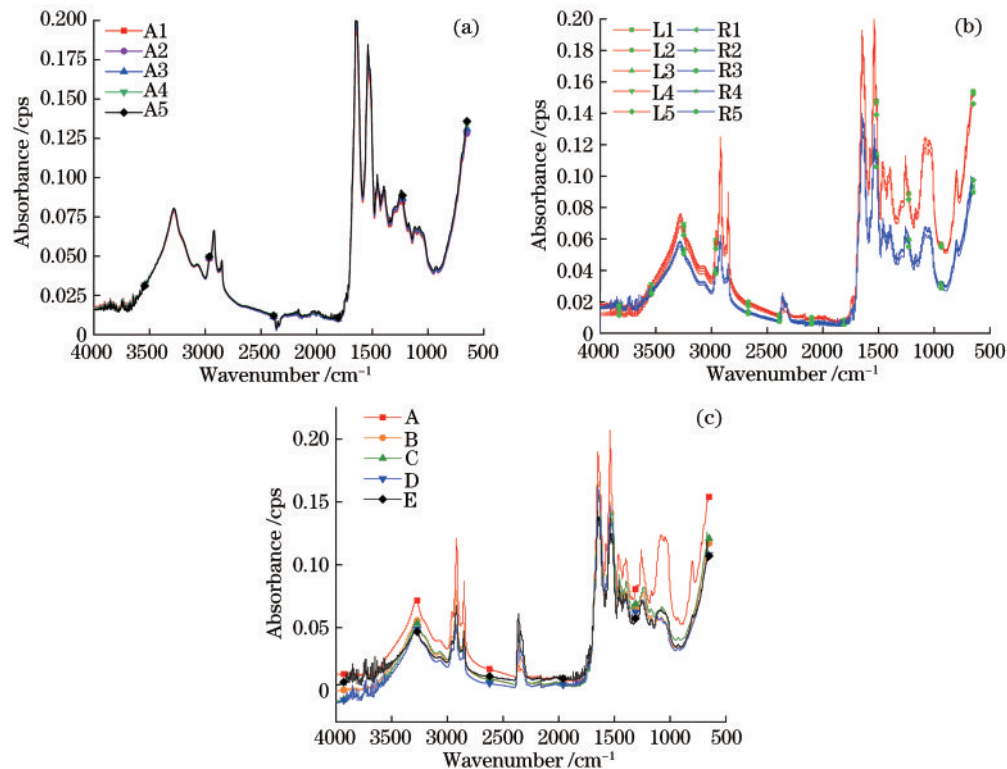


图1 指甲样本红外光谱图。(a)同一指甲样本的不同采集部位红外光谱图;(b)同一人的十指指甲样本红外光谱图;(c)不同人的指甲样本红外光谱图

Fig. 1 Infrared spectra of fingernail samples. (a) Infrared spectra of different sampling sites for the same fingernail sample; (b) infrared spectra of ten fingernails from the same person; (c) infrared spectra of fingernail samples from different people

随机挑选不同城市的5名志愿者,分别采集他们十指指甲样本的红外谱图,结果显示同一人的十指指甲谱图差别并不明显,仅有一位志愿者的左右手指甲谱图出现较为明显的区别,其谱图信息如图1(b)所示,其中L1~L5、R1~R5分别表示左手和右手五指指甲的光谱谱图。由图1(b)可知该名志愿者左右手指甲红外光谱图的峰形差别并不明显,只是左手五指指甲的相对峰高略高于右手,而同一只手五指指甲的红外光谱图并无明显区别。

上述5名志愿者的左手拇指指甲的红外光谱图如图1(c)所示,A~E分别表示不同的志愿者,结果显示不同人指甲的红外谱图整体趋势较为相似,但峰形和相对峰高有所区别。所有样本均在波数为3292、1618、1532、1241 cm^{-1} 等处有较为明显的窄峰,在波数为2925 cm^{-1} 处各有一左高右低的双峰,在波数为1079 cm^{-1} 处有一宽峰且相对峰高有所差别,另外在其他波数处有一些不明显的峰,具体峰位置及对应振动类型^[10]见表1。根据上述结果可知,不同城市居民指

表 1 红外光谱峰及其振动方式

Table 1 Spectral peaks and their modes of vibration

Wavenumber / cm^{-1}	Mode of vibration
3292	O-H stretching, carboxyl acid and derivatives
3068	Amide A and B and NH stretching
2925	C-H symmetric stretching (CH ₂ and CH ₃ anti symmetric and symmetric stretching modes)
2858	C=C stretching
1618	Amide II, C-N stretch and N-H in plane bend
1532	C-H deformation in CH ₂
1461	Amide III band, C-N stretching vibrations
1241	C-C trans conformation
1062	Cis-R, CH=CHR
756	

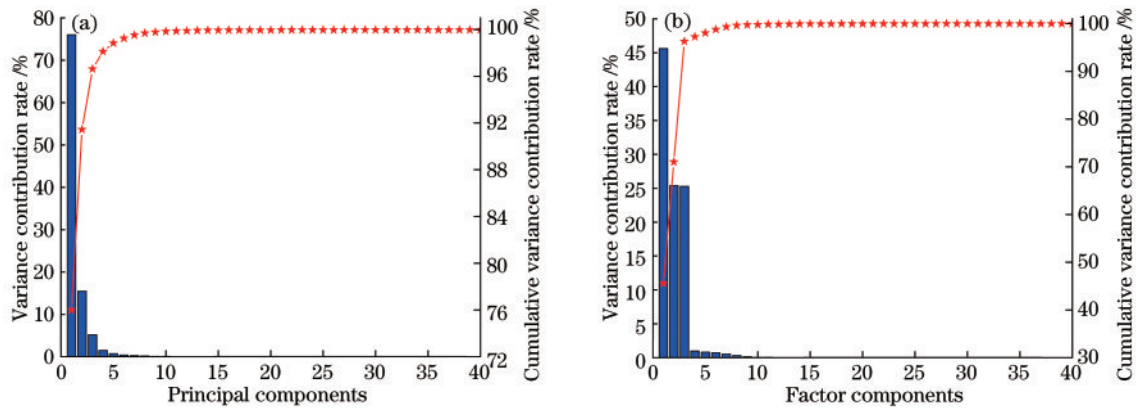


图 2 主成分和因子成分的方差贡献率。(a)主成分;(b)因子成分

Fig. 2 Variance contribution rate depending on number of principal components and factor components. (a) Principal components; (b) factor components

3.2.2 基于两种神经网络模型的不同地域分类结果

使用 MLP 神经网络和 RBF 神经网络对经 PCA 和 FA 降维后的特征向量进行建模分析,选用样本总量的 70% 作为训练集,其余样本作为验证集,两种神经网络在不同维度特征变量下的分类识别率如图 3 所示。

由图 3 数据可知,随着特征变量维度的升高,MLP 和 RBF 的分类识别率均呈现上升趋势,其中 MLP 模型在前 5 维特征变量下训练集和测试集的分类识别率提高较快,而后基本维持在 100% 左右。当特征变量维度较高时,模型的分类识别率出现一定程度的波动和下降,这可能是由于冗余的数据信息对模型分类精度产生了不利影响;RBF 模型分类识别率虽然整体呈现上升趋势,但波动较为明显,由此可见 MLP 神经网络对于不同地域指甲样本的总体分类识别能力强于 RBF 神经网络。

对于 MLP 和 RBF 模型,使用 PCA 和 FA 降维后

甲的红外谱图存在细微的区别,这就为区分不同地域居民的指甲样本提供了一定的基础。但仅仅依靠谱图比对进行分类识别不仅费时费力,而且难以获得较高的准确率,而借助化学计量学的相关知识可有效解决这一问题,从而达到快速准确区分不同地域居民指甲样本的目的。

3.2 基于不同地域的分类结果

3.2.1 PCA 和 FA 降维结果

PCA 和 FA 的降维结果如图 2 所示。PCA 中前 3 个主成分 PC1、PC2 和 PC3 的方差贡献率分别为 76.0%、15.45% 和 5.18%,前 40 个主成分的累计方差贡献率超过 99.98%。FA 中前 3 个因子成分 FC1、FC2 和 FC3 的方差贡献率分别为 45.61%、25.40% 和 25.27%,前 40 个因子成分的累计方差贡献率同样超过 99.98%。以上结果表明 PCA 和 FA 后得到的 40 维特征变量能够基本解释原始变量的全部信息,可以用于后续分析。

数据进行建模时的分类识别率并未见明显的差异,两种降维方法均可使指甲样本的分类达到较好的效果,因此在后续实验中选择 PCA 降维后的数据进行建模分析。

3.2.3 基于 DT 模型的不同地域分类结果

分别采用不同算法 (CHAID、穷举式 CHAID、CRT 和 QUEST) 构建不同地域指甲样本的 DT 模型,不同算法下模型分类识别率如表 2 所示,其中 R1~R7 分别代表来自华北、东北、华东、华中、华南、西南和西北 7 大地区的指甲样本。

由表 2 可知,不同算法下 DT 模型分类效果具有一定的差异,其中基于 CHAID 算法的模型分类识别率最高,训练集和测试集的总体分类正确率分别为 91.0% 和 92.0%,除东北地区 (R2) 外其余各地区的分类效果相对较为均衡,分类识别率均在 80% 以上;而基于 QUEST 算法的模型分类识别率相对较低,训练集和测试集总体正确率分别为 84.8% 和 73.7%,其

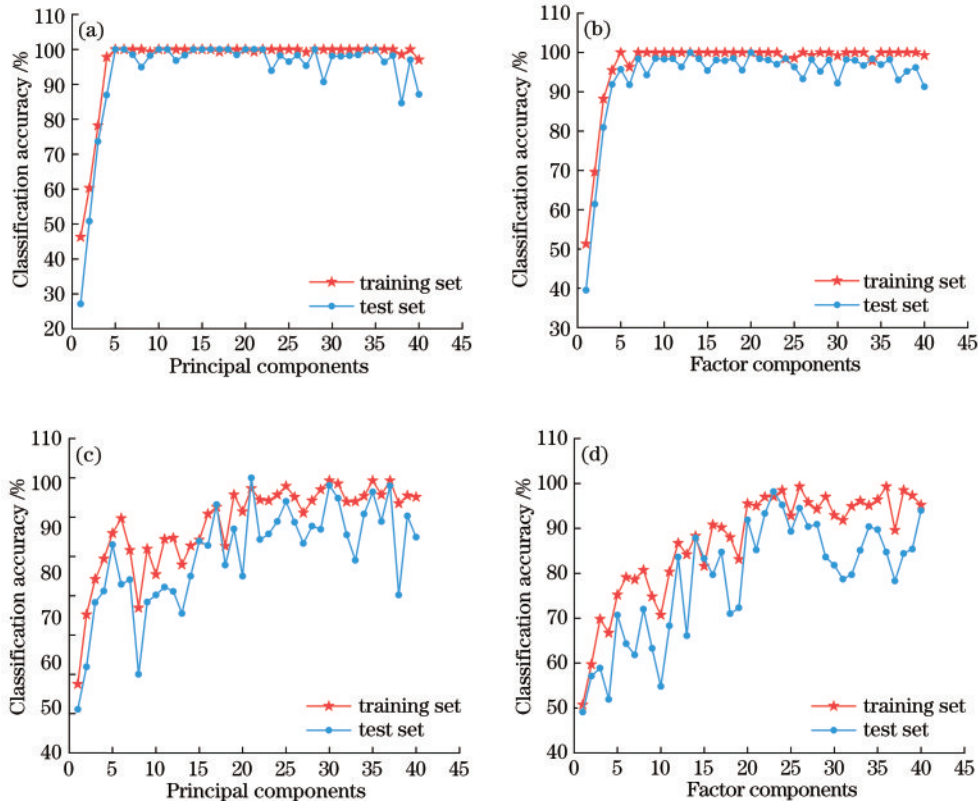


图 3 基于 PCA 和 FA 降维的 MLP 和 RBF 模型分类识别率。(a) PCA-MLP; (b) FA-MLP; (c) PCA-RBF; (d) FA-RBF
 Fig. 3 Classification accuracy of MLP and RBF models based on PCA and FA dimensionality reduction. (a) PCA-MLP; (b) FA-MLP; (c) PCA-RBF; (d) FA-RBF

表 2 基于不同算法的 DT 模型的分类识别率
 Table 2 Classification accuracy of decision tree model based on different algorithms

Region	Classification accuracy / %							
	CHAID		Exhaustive CHAID		CRT		QUEST	
	Training set	Test set	Training set	Test set	Training set	Test set	Training set	Test set
R1	92.9	94.4	82.6	92.9	97.6	84.2	87.2	81.0
R2	62.5	50.0	57.1	66.7	71.4	66.7	100.0	100.0
R3	97.2	92.9	96.4	86.4	86.1	85.7	94.3	93.3
R4	100.0	83.3	80.0	100.0	66.7	100.0	85.7	33.3
R5	84.2	100.0	91.7	62.5	85.7	83.3	94.7	100.0
R6	88.9	100.0	100.0	80.0	84.6	57.1	73.3	100.0
R7	94.4	100.0	100.0	100.0	95.0	100.0	46.7	20.0
Total	91.0	92.0	89.2	86.2	89.1	82.8	84.8	73.7

中西北地区(R7)的分类识别效果最差,仅为46.7%和20.0%。4种算法的总体分类效果较为良好,但均存在对于某一个地区指甲样本分类识别率较低的现象,这表明使用DT模型实现每个地区指甲样本的准确区分尚存在一定难度。

3.2.4 基于SVM模型的不同地域分类结果

采用基于不同核函数(RBF、多项式、Sigmoid、线性)的SVM模型开展对于不同地域指甲样本的分类工作,不同核函数下模型的分类识别率如表3所示。结果表明基于多项式核函数的SVM模型分类效果最

佳,能够实现来自7大地区指甲样本的完全区分;而以Sigmoid为核函数的SVM模型分类识别率最低,训练集和测试集的正确率分别只有47.3%和50.0%;RBF和线性核函数虽未能实现完全区分,但各自的分类识别率均在80%以上,分类效果仅次于多项式核函数。

基于多项式核函数的SVM模型下7大地区指甲样本的空间分布结果如图4所示,其中SVM-1、SVM-2和SVM-3分别表示三维空间分类的特征轴,R1~R7所表示的含义与上文3.2.3节相同。通过可视化的分类结果可以明显看出,通过SVM模型的建模分类,来自不

表 3 不同核函数下 SVM 模型的分类识别率

Table 3 Classification accuracy of support vector machine model based on different kernel functions

Type	Classification accuracy / %			
	RBF kernel	Polynomial kernel	Sigmoid kernel	Linear kernel
Training set	90.8	100.0	47.3	88.6
Test set	92.2	100.0	50.0	82.8

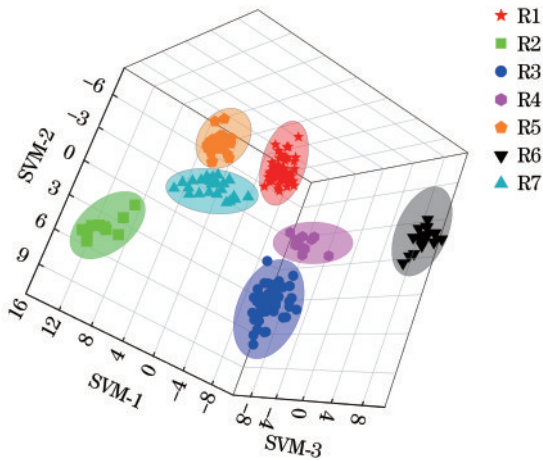


图 4 基于 SVM 模型的指甲样本空间分布图

Fig. 4 Spatial classification details of fingernail samples based on SVM model

同地区的指甲样本实现了完全的区分,表明 SVM 模型在区分不同地域指甲样本方面具有较为明显的优势。

3.3 华北地区 5 省市指甲样本分类结果

在司法鉴定领域,物证的溯源分析要求尽可能精细化和确切化,这有利于公安机关缩小侦查范围,节省办案时间和办案成本。因此在实现 7 大地区指甲样本的完全区分后,继续对来自同一地区不同省份的指甲样本开展进一步的识别和分类是十分必要的。在此项研究中选择来自华北地区的北京市、天津市、河北省、山西省和内蒙古自治区的 60 份指甲样本作为研究对象,对其红外谱图数据进行建模分析。之所以以华北地区为例,一方面在于该地区的样本数量较多,有助于开展建模分析;另一方面上述 5 个省市在地理上分布较为集中,气候环境等因素差别较小,实验结果具有一定的代表性。选择上述多元统计方法中表现较好的 SVM 模型开展华北 5 省市指甲样本的分类识别工作,该模型在不同主成分特征变量下的分类识别率如图 5 所示。

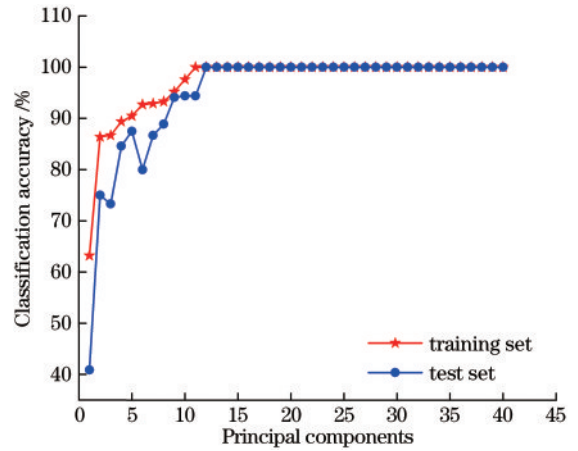


图 5 基于不同特征变量的 SVM 模型分类识别率

Fig. 5 Classification accuracy of SVM model based on different principal components

由图 5 可知,随着特征变量数量的增加,SVM 模型的正确率不断提高,最终在 12 维特征变量处训练集和测试集的正确率均达到 100% 并保持不变,实现了华北 5 省市指甲样本的完全区分,该模型下各省市指甲样本的空间分布图如图 6 所示,其中 X、Y 和 Z 分别表示 SVM 模型三维空间的坐标轴。由图 6 可知,华北 5 省市指甲样本在空间中的分布较为集中,这表明不同省市之间指甲样本的差异并不明显,但通过构建多元统计模型可以实现不同省份指甲样本的准确判别和区分。这一结果证明了使用红外光谱技术结合化学计量学方法开展指甲样本的溯源分析工作具有一定的可行性。

为了验证模型对于未知指甲样本分类的适用性,在建模前随机将部分已知样本的标签抹去用于充当未知样本,采用上述方法中分类效果较好的 MLP 和 SVM 分别构建基于 7 大地区和华北 5 省市指甲样本的分类模型,通过模型给出的预测值与实际值进行对比即可得出这两种模型对于未知样本分类的准确性,实验结果如表 4 所示,其中项目 1 和项目 2 分别表示 7 大地区和华北 5 省市指甲样本的分类情况。

由表 4 可知,MLP 和 SVM 模型对于华北 5 省市抹去标签的未知类型指甲样本全部实现了正确的区分,分类识别率均达到了 100%;在对 7 大地区未知种类指甲样本进行判别分类时,MLP 和 SVM 的分类识别率分别为 94.7% 和 100%。这一结果表明,与 MLP 模型相比,SVM 模型能够更加准确地对指甲样本进行判别分类,进而更好地实现指甲物证的溯源分析。

表 4 MLP 和 SVM 模型对未知种类样本的分类结果

Table 4 Classification results of unknown samples by MLP and SVM models

Project	Total number of samples	Number of unknown samples	Number of correctly classified samples		Classification accuracy / %	
			MLP	SVM	MLP	SVM
1	195	57	54	57	94.7	100.0
2	60	15	15	15	100.0	100.0

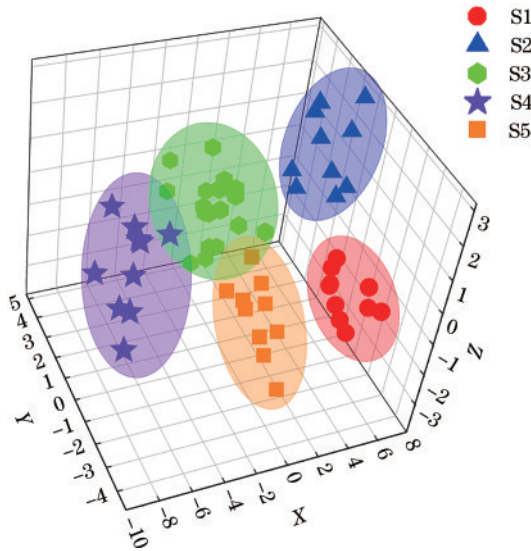


图6 华北5省市指甲样本的空间分布图

Fig. 6 Spatial classification details of fingernail samples from five provinces of north China

与近年来的其他相关研究相比,本文方法和结论更具先进性。以 Sharma 等^[10]的研究为例,该研究采用 ATR-FTIR 结合 PCA 降维和偏最小二乘回归分析 (PLS-DA) 法对 100 份指甲的性别进行了检测分析,构建了性别判别的二分类模型,结果表明女性和男性指甲的分类识别率分别为 100% 和 90%,总体分类识别率为 95%。与该研究相比,本文实现了指甲样本的地域来源判别,且所采用的 PCA-SVM 模型的分类识别率可达 100%,可为生物物证的溯源分析提供一种新的思路和方法;另外在样品的前处理过程中由于是对指甲样本的外侧进行扫描和信息采集,因此无需对其进行清洗处理,这使得指甲样本经光谱检测后仍可进行内侧的微量物证检测,保证了指甲物证的原始状态,这在一定程度上反映了本文方法的先进性和创新性。

4 结 论

以来自全国 7 大地区 18 个省市共计 195 名志愿者的指甲样本为研究对象,借助 MLP 神经网络、RBF 神经网络、DT 和 SVM 等多元统计模型对其 ATR-FTIR 图数据进行建模分析,开展了对于不同地域来源指甲样本的溯源分析。实验数据表明 PCA 和 FA 两种降维方法在后续建模分析方面差别不大;与其他多元统计方法相比,SVM 模型在指甲样本地域分类方面更具优势,采用 PCA-SVM 模型能够实现 7 大地区和华北 5 省市指甲样本的完全准确区分。该研究为司法鉴定领域开展指甲物证溯源分析提供了一种快速无损的新方法,提出方法操作简单、准确率高且不会对样品产生破坏,能够在一定程度上为公安机关检验和分析人体指甲物证提供借鉴和参考。

参 考 文 献

- [1] 何欣龙,梅宏成,王继芬,等. 人指甲中氢、氧稳定同位素在法医学领域的应用[J]. 人类学学报, 2020, 39(3): 483-494.
He X L, Mei H C, Wang J F, et al. Research and application on hydrogen and oxygen stable isotopes of human fingernails in forensic science[J]. Acta Anthropologica Sinica, 2020, 39(3): 483-494.
- [2] Zhou W L, Wang P G, Wittenberg J B, et al. Simultaneous determination of cosmetics ingredients in nail products by fast gas chromatography with tandem mass spectrometry[J]. Journal of Chromatography A, 2016, 1446: 134-140.
- [3] 冯雪伊,陈航,沈敏,等. 微波辅助提取/液相色谱-串联质谱法同时测定人体指甲中 14 种抗精神失常及安眠镇静类药物[J]. 分析测试学报, 2016, 35(10): 1233-1240.
Feng X Y, Chen H, Shen M, et al. Simultaneous determination of 14 antipsychotic and sedative substances in human nails using microwave-assisted extraction combined with liquid chromatography-tandem mass spectrometry[J]. Journal of Instrumental Analysis, 2016, 35(10): 1233-1240.
- [4] Batista B L, Rodrigues J L, Nunes J A, et al. Simultaneous determination of Cd, Cu, Mn, Ni, Pb and Zn in nail samples by inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) after tetramethylammonium hydroxide solubilization at room temperature: comparison with ETAAS[J]. Talanta, 2008, 76(3): 575-579.
- [5] 何亚,刘昌景,梅宏成,等. 阿克苏、连云港和淮安城市居民头发中氢、氧稳定同位素比值差异研究[J]. 质谱学报, 2019, 40(6): 575-583.
He Y, Liu C J, Mei H C, et al. Study on the difference of hydrogen and oxygen stable isotope ratios of Aksu, Lianyungang and Huai'an urban residents' hair[J]. Journal of Chinese Mass Spectrometry Society, 2019, 40(6): 575-583.
- [6] Beattie J R, Cummins N M, Caraher C, et al. Raman spectroscopic analysis of fingernail clippings can help differentiate between postmenopausal women who have and have not suffered a fracture[J]. Clinical Medicine Insights: Arthritis and Musculoskeletal Disorders, 2016, 9(1): 109-116.
- [7] 汪红艳,吕银,王凡,等. 食管癌患者指甲的红外光谱研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2008, 28(2): 331-334.
Wang H Y, Lü Y, Wang F, et al. Study on FTIR spectra of finger nails of normal people and patients of esophagus cancer[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2008, 28(2): 331-334.
- [8] Dittmar M, Dindorf W, Banerjee A. Organic elemental composition in fingernail plates varies between sexes and changes with increasing age in healthy humans[J]. Gerontology, 2008, 54(2): 100-105.
- [9] Brzózka P, Kolodziejki W. Sex-related chemical differences in keratin from fingernail plates: a solid-state carbon-13 NMR study[J]. RSC Advances, 2017, 7(45): 28213-28223.

- [10] Sharma A, Verma R, Kumar R, et al. Chemometric analysis of ATR-FTIR spectra of fingernail clippings for classification and prediction of sex in forensic context[J]. *Microchemical Journal*, 2020, 159: 105504.
- [11] Widjaja E, Lim G H, An A. A novel method for human gender classification using Raman spectroscopy of fingernail clippings[J]. *The Analyst*, 2008, 133(4): 493-498.
- [12] Ghritlahre H K, Prasad R K. Exergetic performance prediction of solar air heater using MLP, GRNN and RBF models of artificial neural network technique[J]. *Journal of Environmental Management*, 2018, 223: 566-575.
- [13] 侯伟, 王继芬. 基于红外指纹光谱的快速鉴别黑色记号笔墨水[J]. *激光技术*, 2020, 44(4): 436-440.
Hou W, Wang J F. Rapid identification of the black marker ink based on infrared fingerprint spectroscopy[J]. *Laser Technology*, 2020, 44(4): 436-440.
- [14] 潘立剑, 陈蔚芳, 崔榕芳, 等. 基于激光诱导击穿光谱与径向基函数神经网络的铝合金定量分析[J]. *激光与光电子学进展*, 2020, 57(19): 295-301.
Pan L J, Chen W F, Cui R F, et al. Quantitative analysis of aluminum alloy based on laser-induced breakdown spectroscopy and radial basis function neural network[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2020, 57(19): 295-301.
- [15] 侯伟, 王继芬, 何欣龙. 基于多元建模的甲基苯丙胺及其常见添加剂混合物光谱分类识别[J]. *激光与光电子学进展*, 2021(3): 0330003.
Hou W, Wang J F, He X L. Spectral classification and identification of methamphetamine and its common additives based on multivariate modeling[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2021(3): 0330003.
- [16] Charbuty B, Abdulazeez A. Classification based on decision tree algorithm for machine learning[J]. *Journal of Applied Science and Technology Trends*, 2021, 2(1): 20-28.
- [17] 马永杰, 马芸婷, 陈佳辉. 结合卷积神经网络多层特征和支持向量机的车辆识别[J]. *激光与光电子学进展*, 2019, 56(14): 141001.
Ma Y J, Ma Y T, Chen J H. Vehicle recognition based on multilayer features of convolutional neural network and support vector machine[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2019, 56(14): 141001.
- [18] Balabin R M, Safieva R Z, Lomakina E I. Near-infrared (NIR) spectroscopy for motor oil classification: from discriminant analysis to support vector machines[J]. *Microchemical Journal*, 2011, 98(1): 121-128.