# 软件开发对光谱研究的推动：技术革新

2201李俊辉

光谱研究作为一个通过分析物质与电磁波（光）相互作用产生的吸收、发射或散射光谱，来探究物质组成、结构及动态过程的科学，其对于研究物质表征十分重要，而在传统光谱研究中，长期以来面临数据复杂性、经验依赖、通量限制三大瓶颈。作为一个软件工程的学生，我认为软件开发对于这几个难题有很好的解决方法。

光谱数据的复杂性（如重叠峰、基线漂移、噪声干扰）是制约分析精度和效率的核心难题。而软件开发通过算法优化、自动化处理和智能分析，正在系统性解决这些问题。在重叠峰解析方面，传统的人工分峰方法依赖经验且效率低下，而软件开发带来了新的解决方案。而我们是否可以通过算法进行分峰，这便能有效的避免了人工所带来的误差。而在基线漂移和噪声干扰方面，通过查阅资料我们可以知道，软件开发同样为传统方法带来革新，软件开发通过对传统算法进行优化，从而能够更清晰地得到我们想要的光谱。

经验依赖同样是光谱研究中的一个难题。在传统光谱研究中，工作流程严重依赖专家知识（如手动分峰、参数调优、数据解读），导致以下问题：主观偏差：不同分析人员可能得出矛盾结论；效率低下：人工处理耗时；知识传承难：专家经验难以标准化和规模化。而相应的，软件开发给出了他的答案。软件开发通过自动化流程、知识嵌入、可解释AI和人机协同，将“专家经验”转化为标准化算法、透明化规则和可复用的知识库。软件的角色将从“工具”升级为“虚拟专家”，彻底改变经验驱动的传统研究范式。未来我们可以看到，软件将进一步消除经验壁垒。全自动报告生成可输入原始数据并输出结构化报告，终身学习系统持续从用户反馈中学习并迭代升级模型，虚拟专家助手基于大语言模型提供交互式指导。

通量限制是光谱、质谱、成像等技术在实际应用中的核心瓶颈，初看到这个名词时，相对于前两个的明显易懂，而这个则较为晦涩。通过查资料了解后，我知道这个瓶颈大致表现为：数据采集速度慢（如高分辨质谱单样本需数小时）；处理效率低（如人工分峰、基线校正耗时）；硬件资源竞争（如同步辐射光源机时紧张）。而众所周知，对于数据处理时间慢，效率低的工作，软件开发可以合理优化算法，利用计算机强大的算力和当前火热的人工智能来处理这些工作，而对于硬件资源竞争，我个人认为是否可以开发一个智能算法能够合理利用这些硬件资源，使其更加充分的利用。

总而言之，我认为软件开发在光谱研究扮演的角色主要是通过算法实现自动化而协助人力的工作。除此之外，我认为AI作为当下的一个热潮，对于光谱研究也同样有驱动作用，我们作为软件开发者，在其中扮演的角色不仅仅是“工具提供者”，更是“研究范式的共同设计者”。