

利用迭代软阈值方法抑制恒时演化类核磁共振实验中的采样截断伪峰

蒋滨¹ 何晓敏² 杨运煌¹ 张许¹ 周欣¹
李从刚¹ 杨代文^{*3} 刘买利^{*1}

¹(波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉磁共振中心, 中国科学院武汉物理与数学研究所, 武汉 430071)
²(华中师范大学化学学院, 武汉 430079) ³(新加坡国立大学生物科学系, 新加坡 117543)

摘要 采样截断, 即信号衰减殆尽之前结束采样, 会在核磁共振 (NMR) 谱图中引入振荡状伪峰, 进而影响谱图质量。在多维核磁共振实验中, 为减少实验时间并为后续脉冲序列保留自旋相干, 采样必然在信号衰减完毕之前结束, 因此采样截断在所难免。变迹法 (窗函数法) 可以抑制采样截断造成的伪峰, 但会导致谱峰增宽。线性预测也有助于减小截断伪峰。采样截断最严重的场合, 是在恒时演化类实验中。这类实验的间接维演化时间固定, 因此间接维采样信号强度没有表观衰减。本研究提出的迭代软阈值方法 (Iterative Soft Thresholding, IST) 虽然因为调节参数困难而在一般场合中应用受限, 但恒时演化类 (Constant time, CT) NMR 实验的间接维信号缺乏表观衰减, 这为 IST 处理参数设置提供了简化条件。本研究通过数据模拟和实验数据, 证明了 IST 是抑制 CT-NMR 实验中采样截断伪峰的有效方法, 并与其它相关方法进行了对比。

关键词 核磁共振; 采样截断; 截断伪峰; 伪峰抑制; 迭代软阈值方法

1 引言

核磁共振波谱 (NMR) 作为一种强有力的分析手段已经被应用于多个学科领域, 如化学、生物学, 和物理学等。然而在 NMR 实验中, 常会出现一些伪峰, 包括截断伪峰^[1]、 t_1 噪声^[2,3]、镜像峰^[4]等。这些伪峰会降低谱图质量, 进而影响定性/定量信息的正确提取。因此, 发展抑制伪峰的高效方法一直是 NMR 方法学研究的重要课题。

采样截断, 即在时域信号 (自由感应衰减, Free induction decay, FID) 衰减完毕之前停止采样, 这样会在 NMR 谱图中引入截断伪峰。采样所得时域信号是 FID $f(t)$ 与采样函数 $s(t)$ 的乘积。对时域信号进行傅里叶变换后, 得到的 NMR 谱图是 $F(n)$ 与 $S(n)$ 的卷积。此处的 $F(n)$ 与 $S(n)$ 分别为 $f(t)$ 与 $s(t)$ 的傅里叶变换结果。 $S(n)$ 被称为采样函数 $s(t)$ 的点扩展函数 (Point spread function, PSF)。在常规的均匀采样实验中, 采样函数 $s(t)$ 是离散矩形函数, 因此 $S(n)$ 是 sinc 函数。 $F(n)$ 与 $S(n)$ 的卷积会将 sinc 振荡引入到 NMR 谱图中^[4]。在多维 NMR 实验中, 间接维采样点数决定实验时间的长短, 因此间接维上的采样点数通常较少, 以避免过长的实验时间, 从而在间接维引入截断伪峰。此外, 多维实验中也需为间接维演化期之后的磁化矢量保留相干信号, 这也限制了间接维采样时间。

对于恒时演化类型 (Constant-time, CT) 实验, 采样截断效应尤为严重。这类实验被设计用于去除谱图中的 J 耦合裂分, 以提高谱图分辨率^[5]。在 CT 类实验中, 沿间接维每个采样点的横向弛豫时间是相同的, 因此这些采样信号强度一致, 没有表现出衰减。CT 类型实验是截断伪峰出现的典型场景^[5,6]。

截断伪峰易与弱信号混淆, 导致信息丢失, 所以截断伪峰抑制对于多维 NMR 实验的数据处理是不可或缺的。目前应用最广泛的截断伪峰抑制方法是变迹法, 又称窗函数法^[4]。变迹法将被截断的 FID 与末端衰减的权重函数相乘, 加大 FID 的衰减力度。然而, 变迹法在抑制截断伪峰的同时, 会导致谱峰增宽, 降低谱图分辨率。截断伪峰的抑制效果越好, 谱峰增宽就越明显, 谱峰重叠也越严重。另外一种常用方法是用线性预测来推算被截断采样遗漏的数据^[4,7], 其原理为时间序列中每一个数值都可以表

2017-09-01 收稿; 2017-11-02 接受

本文系国家重点研发计划项目 (Nos. 2017YFA0505400, 2016YFA051201) 和国家自然科学基金项目 (Nos. 21735007, 21475146, 81227902, 21675170) 资助

* E-mail: dbsydw@nus.edu.sg; ml.liu@wipm.ac.cn

示为此前数据的线性组合。在实际处理中,线性预测通常与变迹法结合使用,能够显著减少截断伪峰,提供更好的谱图分辨率,但是依然在一定程度上存在谱峰增宽的现象。

近期出现了一系列基于非均匀稀疏采样 (Non-uniform sampling, NUS) 的快速多维实验技术^[8~13], 但非均匀采样亦会在谱图中引入伪峰。非均匀采样所得的数据,是实际共振信号 $f(t)$ 与采样函数 $s(t)$ 的乘积,因此所得 NMR 谱图是 $F(n)$ 与 $S(n)$ 的卷积。 $F(n)$ 与 $S(n)$ 含义如前所述。显然与采样函数的 PSF 的卷积会在谱图中引入伪峰^[8,14]。通过优化采样模式^[14~16] 或谱图重建方法^[11,17,18], 可抑制这些 NUS 采样造成的伪峰。我们前期曾发展出非均匀采样数据的快速谱图重建方法 GFFT, 和非均匀采样伪峰的抑制方法 NASR^[19]。Zhou 与 Koźmiński 等研究组也分别提出了基于 CLEAN 算法^[20] 的伪峰抑制方法^[17]。压缩感知 (Compressed sensing, CS) ^[21,22] 是目前最有前景的非均匀数据重建方法,能够有效抑制非均匀采样伪峰,因此被广泛应用于多个研究领域,包括 NMR^[10,11] 和 MRI^[23]。在 NMR 波谱学中最常用的 CS 算法有 l_1 范数最小化^[10,24], IST (Iterative soft threshold, 迭代软阈值)^[11,18,24~26], 及 IRLS (Iterative reweighted least squares) 等。

检视以上所述截断伪峰与非均匀采样伪峰的成因, 容易发现这两种伪峰均由采样函数的 PSF 卷积造成。因此非均匀采样伪峰的抑制处理方法, 经过修改之后也可以用于抑制均匀采样实验中的截断伪峰。近期, 一种类似于 SSA 算法 (Signal separation algorithm)^[15] 的非均匀采样数据重建方法 SMILE (Sparse multidimensional iterative lineshape-enhanced)^[27] 被用于抑制截断伪峰。尽管压缩感知理论上要求采样点随机分布, 但已有报道 IST 通过推算延长采样数据可抑制均匀采样实验中的截断伪峰^[4,24]。IST 的处理效果依赖于参数调节。正如 Kazimierczuk 指出那样, 阈值参数必须与 FID 的衰减速率相匹配^[28]。阈值太低, 会导致伪峰抑制不完全, 而阈值太高则会导致谱峰分裂。然而要准确估计信号衰减速率却非常困难, 如 NMR 扩散排序实验的数据处理等^[29,30]。在同一张谱图中各个谱峰的宽度 (即时域信号的衰减速率) 通常是各不相同的, 然而在 IST 处理中只能设置一个阈值参数, 因此在 IST 推算遗漏采样数据的计算中, 几乎无法找到一个最优的阈值参数值。所以实际上 IST 很少被用于截断伪峰的抑制。

然而, IST 处理中的参数调节在 CT 类型的 NMR 实验中很容易设置, 这是因为在 CT 演化的间接维上信号不表现出衰减, 这意味无需估计信号衰减速率, 可将阈值设为很高的数值, 以适配这种近乎无限小的衰减速率。本研究结果表明, IST 方法是适宜用于 CT 类型 NMR 实验中的截断伪峰抑制方法。IST 方法在 NMR 波谱学中有两种具体实现最为常见, 分别是 IST-D (IST-donoho) 与 IST-S (IST-stern)^[25,28,31], 本研究使用的是 IST-D。

2 理论与模拟

NMR 谱图中的截断伪峰源于无失真的谱图 $F(n)$ 与采样 PSF 的卷积。截断伪峰表现为信号峰底附近的 sinc 函数状振荡。如图 1 所示, 若在 NMR 谱图中选择一个合适的阈值, 并将谱峰中高于该阈值的部分从原谱图截取, 并移至一个空白谱图中, 新谱图中显然没有截断伪峰。这些被截取的谱峰在原谱图中对伪峰贡献可以根据采样函数的 PSF 来计算获得, 并将其从原谱图中减去。在实际处理中, 谱图相减在时域中更为方便。上述过程经多次迭代, 直至阈值接近谱图噪声水平, 最后将所有步骤中被移除的谱峰与原有谱图的剩余部分相加, 即可得到无截断伪峰的谱图。以上过程实际上是 IST-D 算法的流程, 与 l_1 范数最小化是等价的^[24,28,31]。此方法与被用于非均匀采样数据重建的 CLEAN 算法有些相似^[15,17,20], 区别在于 CLEAN 每次迭代挑选强度最高信号峰的全部, 而此方法截取谱图中高于阈值的全部部分。

此处理方法的详细过程如图 2 所示。首先, 被采样截断的原始时域数据 $f_1(t)$ 通过填零 (Zero filling, ZF) 扩展到一定长度, 并且用快速傅里叶变换 (Fast Fourier transform, FFT) 到频域得到 NMR 谱图 $F_1(n)$ 。选择一个阈值, 将原谱图中所有高于该阈值的部分移至一个空白谱图中得到新谱图 $F_1'(n)$ 。既然采样截断造成的振荡状伪峰远低于相应的信号峰, 那么通过挑选合适的阈值, 可以使新谱图中不出现截断伪峰。利用逆傅里叶变换 (iFFT) 将新谱图 $F_1'(n)$ 变换至时域, 并通过截断将其与采样数据 $f_1(t)$ 对齐长度得到时域数据 $f_1'(t)$ 。根据傅里叶变换的卷积定理, $f_1'(t)$ 即包含了阈值以上被选信号部分,

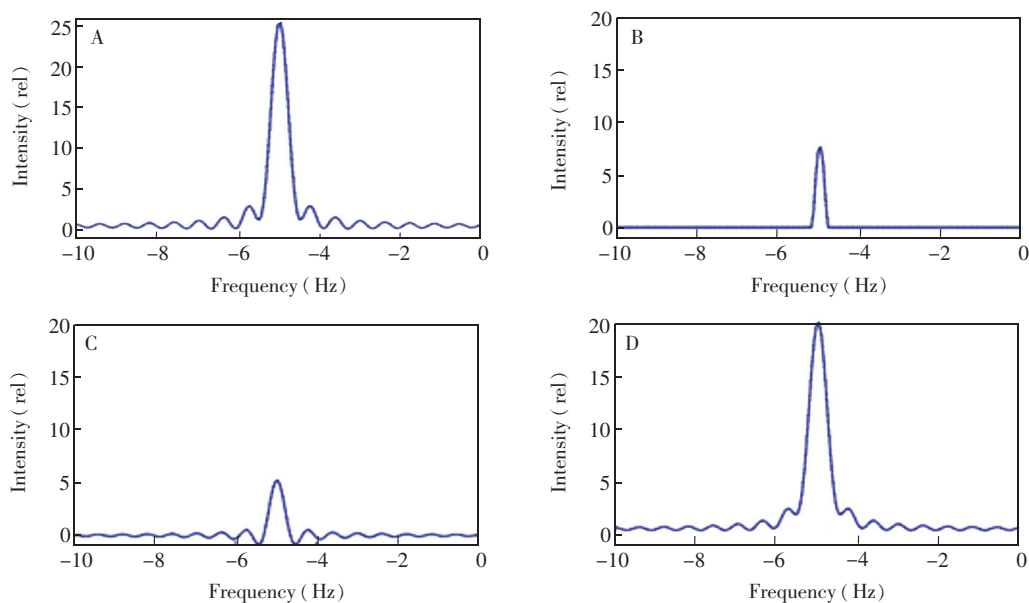


图 1 IST-D 抑制采样截断伪峰原理的模拟图。(A) 一个带有截断伪峰的信号峰;(B) 图(A)中被截取的谱峰部分;(C) 图(B)中信号峰与其对截断伪峰贡献;(D) 图(A)与图(C)之差。可见图(D)中的伪峰较图(A)有明显减弱。为了便于展示,此模拟中被截取的谱峰部分远大于真实处理过程中被截取的部分

Fig. 1 Simulation showing the principle of truncation artifacts suppression using iterative soft threshold-donoho (IST-D). (A) a peak with truncation artifacts. (B) the extracted part of (A). (C) the truncation artifacts contribution of (B) plus itself. (D) the difference of (A) and (C). Clearly, the artifacts in (D) is weaker than those in (A). The subtracted part in this simulation is much larger than in real processing, for sake of clear demonstration

以及它们对截断伪峰贡献。将 $f_1'(t)$ 从采样数据 $f_1(t)$ 中减去, 获得时域数据 $f_2(t)$, 继而对 $f_2(t)$ 进行傅里叶变换获得谱图 $F_2(n)$ 。由前述分析可知, $F_1'(n)$ 中的谱峰与其对截断伪峰贡献都不再出现于 $F_2(n)$ 中。迭代以上步骤, 直至阈值降至噪声水平附近, 如图 2 所示。将迭代过程中所有被移除的谱峰与最后一次迭代后的谱图加和, 得到最终结果。以上即是使用 IST 方法延长时域数据来抑制截断伪峰的全部步骤。

一般情况下, 使用以上方法的难点在于选择合适的阈值。Shchukina 等^[28]指出, 此阈值的设置需适配 FID 信号的衰减速率。时域信号衰减速率实际上等价于谱图中谱峰宽度。准确预估谱峰宽度极为困难, 且谱图中不同谱峰的宽度常差别很大, 因此到目前为止 IST 很少被用于抑制截断伪峰。然而, 恒时演化类型 (CT) 的 NMR 实验是一个例外。CT 实验的间接弛豫衰减时间对于所有采样点是相同的, 因此在间接维信号不表现出衰减, 这意味着可将 IST 处理中的阈值参数设到很高的数值, 一般为 95% 即可。

为测试 IST 用于 CT 类 NMR 实验中抑制截断伪峰的处理效果, 进行了数值模拟, 如图 3 所示。在频率为 10.0、11.2 和 27.0 Hz 处分别有 3 个信号峰, 面积比为 4:1:9, 横向弛豫速率均为 0.1 rad/s。极低的横向弛豫速率是信号不衰减的很好近似。模拟计算产生了一套短采样数据, 其采样点数为 180; 另外产生一套长采样数据, 其采样点数为

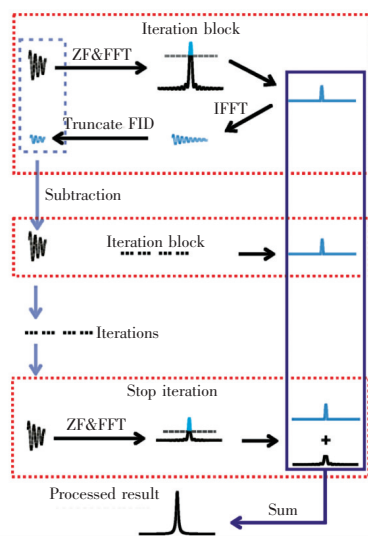


图 2 IST-D 抑制采样截断伪峰流程图
 Fig. 2 Diagrammatic presentation of the procedure to suppress truncation artifacts using IST-D

1024。对长采样数据进行傅里叶变换,得到的参照谱如图 3A 所示。尽管在参照谱中 3 个信号都可被清晰区分,但时域信号衰减极慢,采样被截断,因此在这些信号峰附近依然存在振荡状伪峰。对短采样数据进行傅里叶变换得到谱图,振荡状伪峰得到增强,如图 3B 所示。对短采样数据作变迹法处理后,再进行傅里叶变换的结果见图 3C,变迹法不能完全抑制采样截断伪峰,而且会使得谱峰展宽,导致临近的谱峰重叠。IST-D 的处理结果见图 3D,其中截断伪峰已被完全抑制,且避免了谱峰展宽,使得相邻谱峰可以清晰区分。

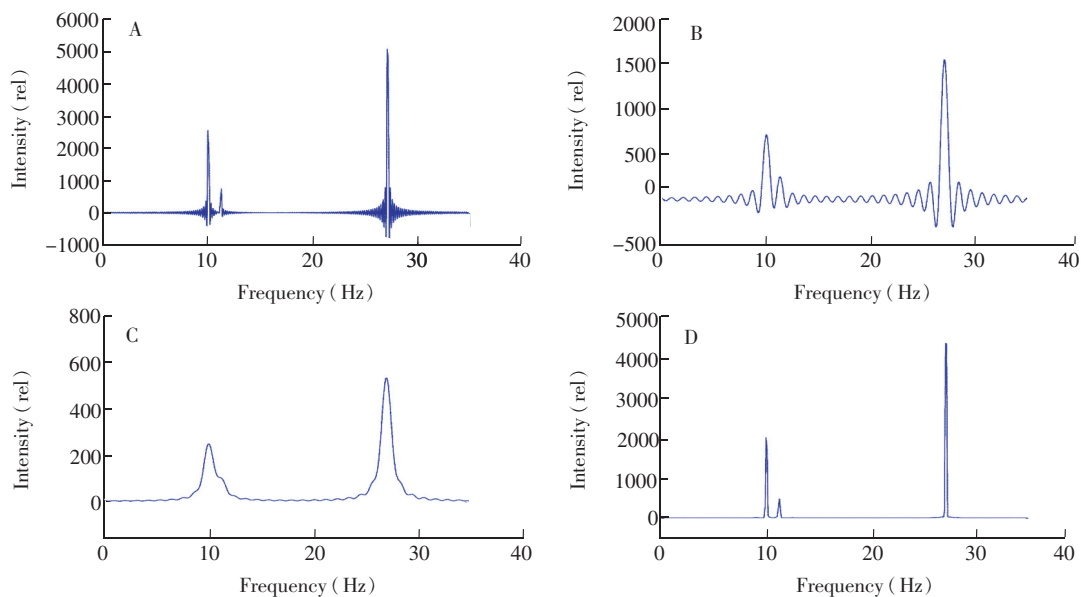


图 3 IST-D 处理截断采样数据的模拟图。作为参照谱,谱图(A)由采样点较多的数据(1024 个复数点)经傅里叶变换而得。谱图(B)由采样点较少的数据(180 个复数点)经傅里叶变换而得。谱图(C)与(D)的时域数据与(B)相同,但谱图(C)由变迹法与傅里叶变换得到,而谱图(D)则是 IST-D 的处理结果
Fig. 3 Simulation of IST-D processing on truncated data. As the reference, spectrum (A) are obtained from the long data set (1024 complex points) by fast Fourier transform (FFT). Spectrum (B) is obtained from the short data set (180 complex points) by FFT. From the same data set, (C) is obtained by apodization and FFT, and (D) is obtained by IST-D

在以上的数值模拟过程中,变迹法处理使用的窗函数为指数衰减函数,其洛伦兹增宽因子为 2.0。两套采样数据均通过填零将采样点数扩展至 2048。在 IST-D 处理中,阈值被设为 0.95,即每次迭代中,谱图中高于最强信号 95% 的所有部分均被移至新的空白谱图中。IST-D 处理迭代次数为 342。

3 结果与讨论

CT-HSQC 是 CT 类实验中最常用的实验方法。为显示 IST-D 抑制截断伪峰的效果,以 ^{13}C - ^{15}N 标记泛素蛋白的重水溶液为样品,在 Bruker Avance III 600 MHz 上完成 CT-HSQC 的二维 NMR 数据采集。所用 CT-HSQC 是 Bax 组提出用于测量蛋白质残余偶极耦合常数(RDC)的脉冲序列^[32]。实验过程中,由 ^{13}C - ^{13}CO J 偶合和 ^{13}C - ^{15}N J 偶合造成的谱峰裂分被间接维恒时演化消除,仅保留 ^1H - ^{13}C J 偶合造成的谱峰裂分,而且甲基会在谱图中表现出强度比为 3:1:1:3 的四重峰模式^[32]。所采集到的全采样数据中,直接维采样点为 1024 个复数点,间接维为 596 个复数点。将间接维前 160 行抽出,得到一个截断采样的时域数据,由其变换而得的谱图如图 4(A~C)所示。图 4D 所示的谱图由全采样的时域数据变换而得,作为参照谱。所有谱图在直接维上的处理是相同的。在图 4A 中,间接维仅使用变迹法进行截断伪峰抑制;在图 4(B、D)中,间接维使用了变迹法和线性预测进行伪峰抑制,且线性预测将间接维数据长度扩展一倍。图 4C 则是 IST-D 的处理结果。间接维处理所用的窗函数均为平方余弦钟函数。在 IST-D 的处理中,阈值为 0.95,迭代次数为 500。为了显示清晰,图 4 仅显示了甲基所在的小部分 NMR 谱图。

由图 4 可见,变迹法能够抑制截断伪峰,但会造成严重的谱峰展宽,降低谱图分辨率。线性预测能显著改善分辨率,但是也未能正确分辨图中红色方框所示的四重峰裂分。相比之下,图 4C 显示谱图信息与图 4D 显示的参照谱相同,而所用采样时间仅为后者的 27%,这表明 IST-D 可以通过减少间接维采样点数来加快常规均匀采样的多维 NMR 实验速度。Shchukina 等^[28]指出,实验速度取决于实验样品本身的 NMR 谱图稀疏性。

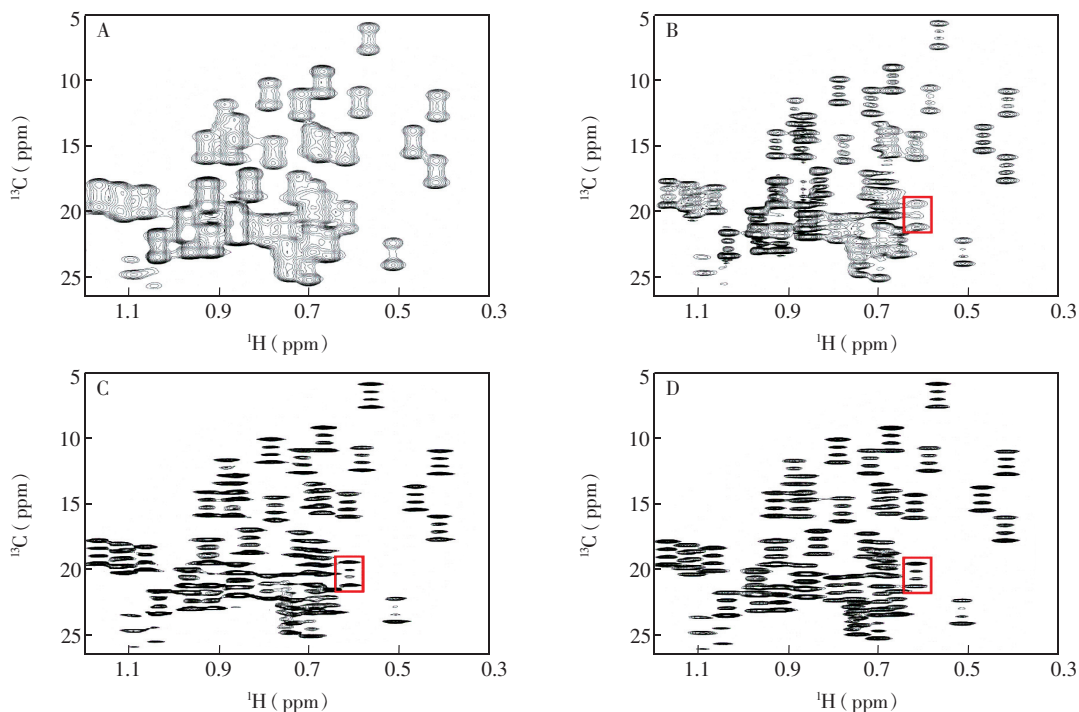


图 4 ^{13}C - ^{15}N 标记泛素蛋白的 J -modulated $[^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}]$ CT-HSQC 谱图。谱图(A~C)来源于同一套在间接维(^{13}C 维)截断采样数据;谱图(D)来源于全采样数据,作为参照谱。谱图(A)使用变迹法抑制采样截断伪峰;谱图(B)在变迹法处理之前,加上线性预测进行处理;谱图(C)是 IST-D 所得处理结果。为显示清楚,这里只显示甲基区域一小部分谱图

Fig. 4 J -modulated $[^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}]$ CT-HSQC spectra of ^{13}C - ^{15}N labeled ubiquitin. The spectra shown in (A), (B) and (C) are from the same sampled data which is truncated in F_1 dimension (^{13}C), and share the same processing parameters in F_2 dimension. In F_1 dimension, a squared cosine window function is applied to produce (A), linear prediction and the same window function are applied on (B), and IST-D is performed on (C). The spectrum with much longer sampling time in F_1 dimension is shown in (D) as reference. Only a small region of methyl groups are shown for sake of detailed display

将 IST-D 的截断伪峰抑制效果与最近 Bax 课题组提出的处理新方法 SMILE^[27] 进行对比。SMILE 方法本质上与 SSA 算法^[15]类似,但具体的实现方式不同。本研究采用 SMILE 方法对前述 CT-HSQC 实验截断采样数据进行处理,为了公平比较,间接维的采样点数亦由 180 扩展至 1024,其余的参数均为软件默认参数。SMILE 处理软件由 Bax 课题组网站下载而得。图 5A 是全采样数据经常规处理所得的参照谱,与图 4D 相同。IST-D 与 SMILE 的处理结果见图 5。图 5(D~F)是图 5(A~C)中沿红线的一维截面,尽管 IST-D 与 SMILE 的处理结果在二维显示图中非常相似,但在一维截面中清晰可见 IST-D 有更好的伪峰抑制效果。

本研究所用 IST-D 处理软件是作者用 C++ 与 Python 语言编写,可与 NMRPipe 软件^[33] 配合使用。图 4 及图 5 中 IST-D 的处理时间为 9.6 min。

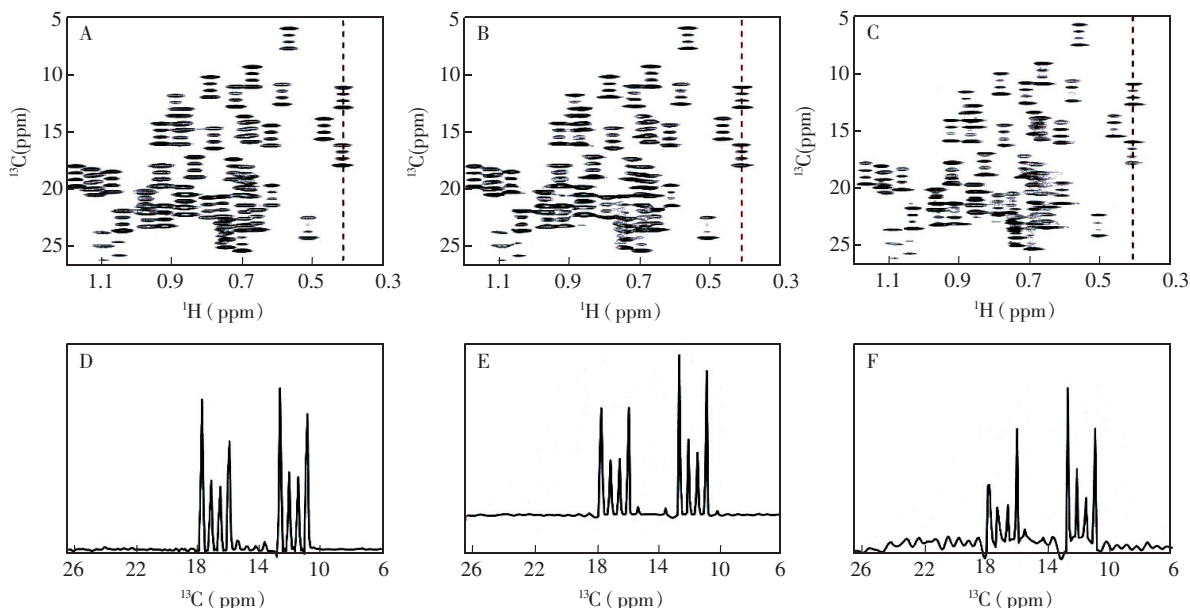


图 5 IST-D 与 SMILE 的处理效果对比。样品与采样数据与图 4 相同。谱图 (A) 由全采样数据处理而得, 作为参照谱; 谱图 (B, C) 由同一间接维截断采样数据而得。图 (B) 为 IST-D 处理结果, 图 (C) 为 SMILE 处理结果。图 (D-F) 分别为图 (A-C) 中沿虚线的一维截面

Fig. 5 2D contour and 1D slices of J -modulated $[^1\text{H}-^{13}\text{C}]$ CT-HSQC spectra of ^{13}C - ^{15}N labeled ubiquitin. A reference spectrum shown in (A) was from the full sampled data, and it is same as Fig. 4D. From the same truncated sampled data, Fig. B and C are obtained using IST-D and SMILE, respectively. B is identical to Fig. 4C. Only a small region of methyl groups are shown for sake of detailed display. D-F are 1D slices along the dotted lines in A-C, respectively.

4 结论

IST 方法可用于抑制 CT 类 NMR 实验中的截断伪峰, 且同时避免了谱峰展宽, 其可行性得到了模拟数据和实验数据的支持。本方法可通过减少间接维采样点数来缩短 CT 类多维实验时间。IST 方法也可能用于其它需经傅里叶变换的场合中截断伪峰的抑制, 如 MRI 等。

References

- 1 Lindon J C, Ferrige A G. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*, **1980**, 14: 27-66
- 2 Mehlkopf A F, Korbee D, Tiggelman T A, Freeman R. *J. Magn. Reson.*, 1984, 58(2): 315-323
- 3 Mo H, Harwood J S, Yang D, Post C B. *J. Magn. Reson.*, **2017**, 276: 43-50
- 4 Hoch J C, Stern A S. *Nmr Data Processing*. Wiley-Liss New York:, **1996**
- 5 Bax A, Freeman R. *J. Magn. Reson.*, **1981**, 44(3): 542-561
- 6 Rance M, Wagner G, Sorensen O W, Wuthrich K, Ernst R R. *J. Magn. Reson.*, **1984**, 59(2): 250-261
- 7 Marple Jr S L. *Digital Spectral Analysis with Applications*. Prentice-Hall, Inc., **1987**: 512
- 8 Kazimierczuk K, Stanek J, Zawadzka-Kazimierczuk A, Kozminski W. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*, **2010**, 57(4): 420-434
- 9 Mandelshtam V A. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*, **2001**, 38(2): 159-196
- 10 Holland D J, Bostock M J, Gladden L F, Nietlispach D. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, 50(29): 6548-6551
- 11 Hyberts S G, Milbradt A G, Wagner A B, Arthanari H, Wagner G. *J. Biomol. NMR*, **2012**, 52(4): 315-327
- 12 Mobli M, Hoch J C. *Concepts Magn. Reson.*, **2008**, 32A(6): 436-448
- 13 Orekhov V Y, Jaravine V A. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*, **2011**, 59(3): 271-292
- 14 Coggins B E, Zhou P. *J. Magn. Reson.*, **2007**, 184(2): 207-221

- 15 Stanek J, Kozminski W. *J. Biomol. NMR*, **2010**, 47(1): 65–77
- 16 Kazimierczuk K, Zawadzka A, Koźmiński W. *J. Magn. Reson.*, **2008**, 192(1): 123–130
- 17 Coggins B E, Zhou P. *J. Biomol. NMR*, **2008**, 42(4): 225–239
- 18 Bostock M J, Holland D J, Nietlispach D. *J. Biomol. NMR*, **2012**, 54(1): 15–32
- 19 Jiang B, Luo F, Ding Y M, Sun P, Zhang X, Jiang L, Li C G, Mao X A, Yang D W, Tang C, Liu M L. *Anal. Chem.*, **2013**, 85(4): 2523–2528
- 20 Högbom J. *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, **1974**, 15: 417
- 21 Donoho D L. *IEEE Trans. Inf. Theory*, **2006**, 52(4): 1289–1306
- 22 Candes E J, Romberg J, Tao T. *IEEE Trans. Inf. Theory*, **2006**, 52(2): 489–509
- 23 Lustig M, Donoho D, Pauly J M. *Magn Reson Med*, **2007**, 58(6): 1182–1195
- 24 Stern A S, Donoho D L, Hoch J C. *J. Magn. Reson.*, **2007**, 188(2): 295–300
- 25 Sun S J, Gill M, Li Y F, Huang M, Byrd R A. *J. Biomol. NMR*, **2015**, 62(1): 105–117
- 26 Kazimierczuk K, Lafon O, Lesot P. *Analyst*, **2014**, 139(11): 2702–2713
- 27 Ying J, Delaglio F, Torchia D A, Bax A. *J. Biomol. NMR*, **2016**, 68(2): 101–118
- 28 Shchukina A, Kasprzak P, Dass R, Nowakowski M, Kazimierczuk K. *J. Biomol. NMR*, **2016**, 68(2): 79–98
- 29 Johnson C S. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.*, **1999**, 34(3): 203–256
- 30 Yuan B, Ding Y, Kamal G M, Shao L, Zhou Z, Jiang B, Sun P, Zhang X, Liu M. *J. Magn. Reson.*, **2017**, 278: 1–7
- 31 Drori I. *EURASIP J. Adv. Signal Process*, **2007**, 2007(1): 1–10
- 32 Kontaxis G, Bax A. *J. Biomol. NMR*, **2001**, 20(1): 77–82
- 33 Delaglio F, Grzesiek S, Vuister G W, Zhu G, Pfeifer J, Bax A. *J. Biomol. NMR*, **1995**, 6(3): 277–293

Suppress Sampling Truncation Artifacts in Constant-time Type Nuclear Magnetic Resonance Experiments Using Iterative Soft Thresholding Method

JIANG Bin¹, HE Xiao-Min², YANG Yun-Huang¹, ZHANG Xu¹, ZHOU Xin¹,
LI Cong-Gang¹, YANG Dai-Wen^{*3}, LIU Mai-li^{*1}

¹(State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics,
Wuhan Institute of Physics and Mathematics, the Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China)

²(College of Chemistry, Central China Normal University, Wuhan 430079, China)

³(Department of Biological Sciences, National University of Singapore, Singapore, 117543)

Abstract Sampling truncation, i. e. sampling ends before signal decays to zero, introduces wiggle-like artifacts that impair the quality of nuclear magnetic resonance (NMR) spectra. In multidimensional (mD) NMR experiments, the first few hundred or less data points are commonly sampled in the indirect dimension, and the truncation is unavoidable. Apodization can suppress truncation artifacts with cost of line-broadening. Linear prediction is also beneficial to the reduction of truncation artifacts. The worst situation is in the constant time (CT) type experiments, where the signal doesn't decay at all in the CT evolution dimension. In this contribution we proposed that, although iterative soft thresholding (IST) was rarely used due to the difficult parameter tuning, it was particularly suitable to suppress the truncation artifacts in the CT type NMR experiments. The simulation and experiments were performed to show the performance of this method. And the processing result was compared with a method proposed recently.

Keywords Nuclear magnetic resonance; Sampling truncation; Truncation artifacts; Artifacts suppression; Iterative soft thresholding

(Received 1 September 2017; accepted 2 November 2017)

This work was supported by the National Key R&D Program of China (Nos. 2017YFA0505400, 2016YFA051201), the National Natural Science Foundation of China (Nos. 21735007, 21475146, 81227902, 21675170).