

联合有限元法和蒙特卡罗模拟的颅骨对光热影响

宋贤林^a, 游博康^a, 李思行^b

(南昌大学 a.信息工程学院;b.际鑫书院,南昌 330031)

摘要:利用 MCmatlab 程序构建了小鼠在有颅骨和无颅骨情况下的脑部光热模型,联合蒙特卡罗方法和有限元法来研究颅骨对脑部光热效应的影响.利用蒙特卡罗方法模拟大量光子在不同脑组织中的传播规律;利用有限元法计算每个单元对光能量的吸收,进而获得脑组织的温度分布.仿真结果表明:在有颅骨的情况下,光在穿过头皮和颅骨时会发生严重的吸收和散射,只有小部分光子能够穿过头皮和颅骨被血管和灰质吸收,光热效应较弱;在无颅骨的情况下,绝大多数的光能够入射到灰质中,血管能够吸收大部分的能量而导致温度上升显著,血管温度上升约 0.2 °C,光热效应明显.

关键词:蒙特卡罗方法;有限元法;颅骨;光热效应;脑成像

中图分类号:Q63

文献标志码:A

文章编号:1000-2367(2024)06-0107-06

脑科学是当前生命科学研究的前沿,发展非常迅速.世界范围内相继启动了脑研究技术,如“欧盟人类脑计划”“美国脑计划”等.我国也于 2021 年提出“脑科学与类脑研究”的发展规划,表明脑科学研究的重要性.脑是中枢神经系统的重要组成部分,是维持机体正常生理活动的重要器官,包括大脑、小脑、脑干等结构^[1].大脑结构极其复杂,主要由大量的神经元、血管和胶质细胞构成,并通过神经血管耦连以实现高级功能,其中大脑皮层是执行高级功能的主要部位.癌症泛指所有恶性肿瘤,是由能够无限增殖的癌细胞导致的疾病,而癌细胞是由遗传因子发生改变的正常细胞转化而来.这部分细胞已经脱离人体正常生理调节,能够经由体内循环系统侵入身体其他部分破坏正常细胞组织.大脑细胞数量庞大,在各种致瘤因子的作用下,细胞分裂过程失控从而形成赘生物.这种赘生物会影响大脑正常活动,并破坏周围健康的细胞.一般称这种赘生物为脑肿瘤^[2].目前,脑肿瘤已经成为一种常见的神经系统疾病,在任何年龄段都有可能患上该病,而发病率最高的是年轻人和儿童群体,同时也是致死率最高的癌症之一.脑瘤的病情发展迅速,并且在病情早期和中期潜伏性强,不易被发现,一旦病情发展到晚期,患者的平均存活期 12 月左右.脑瘤的治愈率并没有随着科技的进步而提升,只有及时发现并及早治疗才能有效提升患者的治愈率与存活时间^[3].

现今对脑瘤的标准治疗以外科手术为主,辅以放疗和化疗等综合治疗措施,然而这些治疗技术都存在各自的局限性^[4].直接切除肿瘤的疗法称为外科手术法,但在切除过程中有可能无法彻底切除肿瘤组织,进而导致复发;利用肿瘤细胞和正常细胞对于放射线敏感性不同而杀死肿瘤细胞的方法称为放疗法,然而放疗也会杀死正常细胞,进而带来诸如:脱发、恶心呕吐及食欲不振等副作用;使用药物抑制肿瘤细胞分裂和转移的方法称为化疗,但由于药物靶向性较差,对自身细胞也有较大的毒害作用.针对当前癌症治疗的难点和纳米医学的优势,研究人员发展了一种新型的癌症治疗技术光热治疗(photothermal therapy, PTT)^[5].光热疗法

收稿日期:2023-05-11;**修回日期:**2023-12-23.

基金项目:国家自然科学基金(62265011);江西省自然科学基金(20224BAB212006;20232BAB202038).

作者简介(通信作者):宋贤林(1992-),男,江西赣州人,南昌大学副教授,博士,研究方向为光声成像,E-mail:songxianlin@ncu.edu.cn.

引用本文:宋贤林,游博康,李思行.联合有限元法和蒙特卡罗模拟的颅骨对光热影响[J].河南师范大学学报(自然科学版),2024,52(6):107-112.(Song Xianlin, You Bokang, Li Sihang. Effect of skull on photothermal effect based on Monte Carlo method and finite element method[J]. Journal of Henan Normal University(Natural Science Edition), 2024, 52(6): 107-112. DOI: 10.16366/j.cnki.1000-2367.2023.05.11.0001.)

通过将激光的光能转化为热能使局部组织快速升温来杀死癌细胞,借助激光的定位作用和非侵入性,光热治疗能够实现恶性肿瘤的定点消除并且不会危害周围正常的细胞组织,如今已经成为一种潜在的外科手术替代方案^[6-8].然而,颅骨的存在对光热治疗有着极大的影响.颅骨的主要成分包括钙质、胶原蛋白、脂类和水.这些组分的折射率各不相同,从而引起了强烈的散射,极大地衰减能够到达肿瘤部位的光线^[9-10].因而光热治疗过程中常选用具有更高的能量和更强透射能力的红外光.

为了探讨颅骨对光热效应的影响,本文采用基于蒙特卡罗法和有限元法的开源 MatLab 程序 MCmatlab 模拟一定波长的激光在小鼠大脑中产生的光热效应,使用 MCmatlab 分别构建小鼠有颅骨和无颅骨情况下的脑部光热模型.通过分析不同情况下的光吸收分布和脑部温度变化来研究颅骨对小鼠脑部光热效应的影响.这项研究既有助于理解光子在大脑各层组织中的传播规律,同时也对应用于人脑的光热治疗研究有一定的参考意义.

1 模型与方法

1.1 基于蒙特卡罗模拟的光传输

蒙特卡罗方法是一种统计模拟方法.其基本思想是:当所求解问题是某种随机事件出现的概率,或者是某个随机变量的期望值时,通过某种“实验”的方法,以这种事件出现的频率估计这一随机事件的概率,或者得到这个随机变量的某些数字特征,并将其作为问题的解.生物组织是一种具有散射和吸收性质的复杂非均匀多层结构,蒙特卡罗法可用于模拟光子在生物组织中的透射过程,进而模拟光子在生物组织中的输运过程.该方法被广泛认为是光组织相互作用理论研究的标准^[11-12].

蒙特卡罗模拟光子传播的过程如附录图 S1 所示.设光子的初始位置为 $(0, 0, 0)$,初始方向余弦为 $(0, 0, 1)$,初始权重 $w = 1$.光子进入生物组织后,其权重减小为 $w = 1 - R_{SD}$,其中 $R_{SD} = (n_0 - n_1)^2 / (n_0 + n_1)^2$ 表示镜面反射的反射系数(n_0 和 n_1 分别代表外部介质和生物组织表层的折射率).在模拟过程中,系统会生成光子并为其分配初始权重 w_0 ,然后发射光子.随后光子在生物组织内以步长 $s = -\ln(\xi) / \mu_1$ 开始移动,其中 $\mu_1 = \mu_a + \mu_s$ (μ_a 为吸收系数, μ_s 为散射系数), ξ 是一个取值范围为 $(0, 1)$ 的均匀分布的随机数.光子的传播方向由方向余弦 (μ_x, μ_y, μ_z) 确定,设光子的当前位置为 (x, y, z) .光子的下一个位置 (x', y', z') 可由 $x' = x + \mu_x s, y' = y + \mu_y s, z' = z + \mu_z s$ 算出.

基于光子的移动步长、初始位置和方向余弦,可以对光子是否能到达生物组织边界进行判断.将光子从当前位置 (x, y, z) 沿其移动方向到达生物组织边界的距离定义为约化步长 $s_1 = \begin{cases} (z_0 - z) / \mu_z, \mu_z < 0, \\ (z_1 - z) / \mu_z, \mu_z > 0. \end{cases}$ z_0 和 z_1 分别表示生物组织在直角坐标系中 z 的上下边界.

如果光子的随机步长 $s < s_1$,则光子无法到达生物组织边界,光子在组织内移动相应的步长.光子在生物组织内移动的过程中,会与生物组织发生相互作用,其中一部分光子会被生物组织吸收,导致光子能量衰减和权重减小.在这种情况下,需要重新计算光子的权重,并判断光子是否能继续移动.光子与生物组织发生 n 次相互作用后,其权重变更为 $w_n = w_0 (\mu_s / \mu_t)^n$.如果光子的权重小于预设的权重阈值(设权重阈值 $w_{th} = 0.0001$),即 $w_n < w_{th}$,则光子无法继续移动,终止追踪该光子,并继续模拟下一个光子,直到所有光子的模拟结束.如果光子的权重大于预设的阈值,即 $w_n > w_{th}$,系统为光子重新分配一个随机步长,然后重复上述过程.在光子的移动过程中,会发生散射,需要计算光子的方位角 ψ 和散射角 θ .当各项异性因子满足特定条件

$g \neq 0$ 时,光子的散射角 $\theta = \arccos\left(\frac{1}{2g} \left[1 + g^2 - \left(\frac{1 - g^2}{1 - g + 2g\xi}\right)^2\right]\right)$.考虑到散射的轴对称性,则光子的方位角

满足 $\psi = 2\pi\xi$.光子的方向余弦 $\mu'_x = \frac{\sin \theta}{\sqrt{1 - \mu_z^2}} (\mu_y \mu_z \cos \psi - \mu_x \sin \psi) + \mu_x \cos \theta, \mu'_y = \frac{\sin \theta}{\sqrt{1 - \mu_z^2}} (\mu_y \mu_z \cos \psi - \mu_x \sin \psi) + \mu_y \cos \theta, \mu'_z = -\sin \theta \cos \psi \sqrt{1 - \mu_z^2} + \mu_z \cos \theta$.

如果光子的随机步长 $s > s_1$,光子能够到达生物组织边界.光子与生物组织相互作用后,根据光子在边界处的入射角 $\alpha_i = \arccos(|\mu_z|)$ 和透射角 α_t 之间的关系,可以判断光子在边界处是发生透射还是全反射.

$$\text{全反射的反射率 } R(\alpha_i) = \frac{1}{2} \left[\frac{\sin^2(\alpha_i - \alpha_t)}{\sin^2(\alpha_i + \alpha_t)} + \frac{\tan^2(\alpha_i - \alpha_t)}{\tan^2(\alpha_i + \alpha_t)} \right].$$

如果此时光子反射率 $\xi > R(\alpha_i)$, 则光子在边界处发生透射. 根据每层生物组织的厚度, 可以判断此时光子所在的边界是组织上下表面还是组织交界面. 若光子到达组织交界面, 则终止对光子在这一层的追迹, 光子透射至下一层组织, 进行后续模拟. 若光子到达组织的上下表面, 则光子发生透射后, 离开组织.

如果此时光子反射率 $\xi \leq R(\alpha_i)$, 则光子在边界处发生全内反射, 然后在组织中散射. 在全内反射的情况下, 光子的方向余弦更新为 $(\mu_x, \mu_y, -\mu_z)$, 光子未消耗的步长(剩余步长)为 $s - s_1$. 如果光子能够再次到达其他组织边界, 重复以上过程. 如果光子不能再次达到其他组织边界, 光子则在组织中移动剩余的步长, 移动过程中与生物组织发生作用, 其中一部分光子会被生物组织吸收, 导致光子能量衰减和权重减小. 当光子的权重小于阈值 $\omega_{th} = 0.0001$ 时, 终止追踪该光子, 然后模拟下一个光子, 直到所有光子的模拟结束^[13]. 通过对所有光子的模拟, 可以获得光在生物组织内部的光能流率 F 和光吸收分布.

1.2 基于有限元法的热传递

有限元法(FEM)是一种常见的为求解偏微分方程边值问题近似解的数值方法. 有限元法的基本思想是将整个计算域进行分割, 离散成有限个单元的集合. 在每个单元中将任意点的未知函数用该分割单元中形状函数及离散网格点上的函数值展开, 建立一个线性插值函数, 进而求解得到每个单元上的近似解. 所有单元上的近似解构成整个计算域的解. 脑部各层吸收了光能量后, 脑部各层会形成光吸收分布, 部分光能量会转换成热能, 并引起温度 T 的变化. 该温度变化可由有限元法进行模拟, 由 $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{q + \nabla \cdot (k \nabla T)}{C}$ 描述^[14], 其中, C 为比热容; t 为时间; k 为热导率; 局部热沉积率(即光吸收能量密度) $q = \text{光能流率 } F \times \text{光吸收系数}$.

1.3 MCmatlab 构建小鼠脑部光热模型

MCmatlab 是一个开源的 MatLab 程序. 该项目受文献^[15]启发, 由蒙特卡罗辐射传热方程求解器和有限元热扩散和热损伤求解器组成. 两者都使用 MatLab 的 MEX 函数来实现^[16]. 利用 MCmatlab 中的有限元热扩散和热损伤求解器来构建小鼠脑部的光热模型. 该程序能够输出脑部组织分层后的三维空间结构图, 同时还能够输出能量吸收图以及各组织的温度变化图, 对观察光在不同脑组织中传播路径以及能量传播有很大帮助.

在有颅骨的情况下, 激光从外界入射到脑组织中, 需要依次经过水层、头皮、颅骨, 才能进入脑组织, 进入脑组织后, 光能够穿过脑脊液进入到充满毛细血管和神经细胞的灰质和白质中. 在无颅骨情况下, 激光从外界入射到脑组织中, 只需要经过水层即可进入脑组织, 进入脑组织后穿过脑脊液进入灰质中. 利用 MCmatlab 分别构建了 2 种情况下小鼠脑部的三维结构, 同时对小鼠脑部结构进行简化. 如附录图 S2(a)所示, 小鼠脑部模型被分为水层、头皮层、颅骨层、脑脊液层、灰质层, 各层厚度分别设定为 3.5 mm、1.0 mm、1.0 mm、0.5 mm 和 10.0 mm, 而灰质中的毛细血管长度为 4.0 mm, 直径为 0.3 mm; 在图 S2(b)中, 小鼠脑部模型中的头皮层以及颅骨层被替换成脑脊液层, 其余部分保持不变^[17]. 各层生物组织的光学参数见附录表 S1、表 S2 和图 S3.

入射光采用高斯光束, 光束波长为 840 nm, 脑部初始环境温度为 310.5 K, 入射脉冲的峰值功率为 1×10^5 W, 脉冲的持续时间为 10 ns, 在脉冲停止后还设置有 5 ns 的观察窗口. 为了更好地还原毛细血管的热学性质, 在血管的模型构建中使用 Arrhenius 方程式中的活化能参数 $E_a = 4.225 \times 10^{-5}$ J/mol 和指前因子 $A = 7.6 \times 10^{-66}$ s⁻¹ 来模拟凝血的分布. 各层组织吸收的能量转换为温度进行显示, 而通过 MCmatlab 可以显示各层组织中的温度分布图, 进而能够了解各层组织吸收能量的情况.

2 结果与讨论

2.1 基于蒙特卡罗模拟的光传输

有颅骨情况下(图 1(a))入射光经过不同的组织时, 由于吸收系数和散射系数的不同会发生不同程度的吸收和散射. 头皮和颅骨处的散射系数较大, 入射光在经过头皮和颅骨时散射的程度比较大. 脑脊液的吸收系数和散射系数都比较小, 入射光在穿过脑脊液时只有小部分被吸收和散射. 血管的吸收系数比较大, 能够

吸收较多能量.无颅骨情况下(图 1(b)),加上水层和脑脊液层的散射系数都比较小,入射光几乎没有发生散射而是直接穿过水层和脑脊液层,大部分入射光能够到达血管和灰质并被吸收,能量吸收变化明显.可以较为明显地观察到头皮和颅骨对光在脑部传播的影响:入射光接触到头皮和颅骨后,大部分光被头皮和颅骨所吸收,部分光因散射而偏离入射路径,只有小部分光能够透射入大脑内部.

2.2 温度变化

入射光在入射后会被脑部各层结构吸收,脑组织的温度会依据吸收光能量的多少以及脑组织的比热不同而发生不同变化.当入射光开始照射时,各层组织的温度开始逐渐升高,光功率约在 5 ns 时达到峰值,脑部各层温度在 7 ns 左右达到最高.由图 2(a)可知,有颅骨的情况下,水层的温度从 37.000 0 °C 上升到 37.005 9 °C;头皮层的温度最高,从初始的 37.000 0 °C 升高到了 37.016 9 °C;由于光在穿过头皮时已经被强烈地吸收和散射,并且颅骨对光子散射作用也比较强,因而颅骨层温度仅从 37.000 0 °C 上升到 37.001 9 °C;脑脊液层由于吸收系数比较小,因而脑脊液层温度从 37.000 0 °C 升到 37.000 4 °C;由于头皮和颅骨对光有很强的散射和吸收作用,只有少量光子穿过头皮和颅骨到达血管和灰质层,血管的温度仅从 37.000 0 °C 升到 37.002 9 °C,灰质层的仅从 37.000 0 °C 升高到 37.001 1 °C.由图 2(b)可知,在无颅骨的情况下,水层和脑脊液层的温度分别从 37.000 0 °C 升高到 37.005 9 °C 和 37.012 °C;血管的温度最高,从 37.000 0 °C 升高到了 37.201 2 °C;灰质的温度从 37.000 0 °C 升到 37.083 8 °C.由此可以看出,在无颅骨的情况下,由于没有了头皮和颅骨对光的吸收和散射作用,入射光在穿过水层和脑脊液的过程中,仅有少部分被吸收.其余大部分光能够穿过水层和脑脊液层被血管吸收,因此血管上升的温度较有颅骨时增加了约 0.2 °C.灰质层对光有一定的散射作用,但程度很轻微,并且吸收系数比较大,因而灰质温度仅次于血管温度.

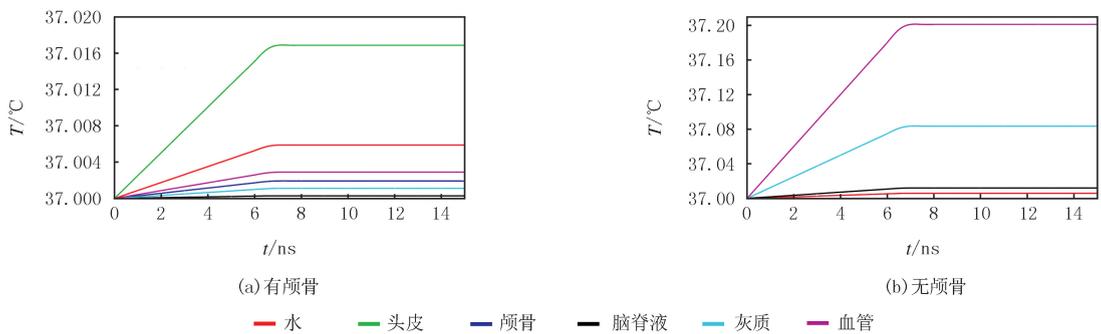


图2 脑部各层温度随时间变化

Fig. 2 The temperature variation of different layers in the brain over time

图 3 的一组图展示了不同的时刻下,有颅骨和无颅骨的脑部各层温度变化过程.入射光还没开始照射时,两者的初始温度都为 37 °C,此时图 3(a)和图 3(b)分别为初始时刻($t=0$ s)开颅和未开颅下光传播情况.随着入射光的照射,当 $t=5$ ns 时,图 3(d)中颜色变化相较于图 3(c)更加明显;当 $t=10$ ns 时,停止激光照射,从图 3(e)和图 3(f)也观察到同样现象,在开颅下血管升温明显;当 $t=15$ ns 时,此时距停止激光照射已经过去 5 ns,从图 3(g)和图 3(h)观察可知,开颅和未开颅骨状态下温度均无明显变化.该结果表明无颅骨情况下,由于更多光子到达血管,血管吸收了更多光能量,光热效应更明显.

3 结 论

本研究利用 MatLab 中的开源程序 MCmatlab 来构建小鼠在有颅骨和无颅骨情况下脑部光热模型,通

过蒙特卡罗方法和有限元法来研究颅骨对脑部光热效应的影响.在有颅骨的情况下,光穿过头皮和颅骨会发生严重的吸收和散射,头皮吸收大量光能量温度迅速升高,达到 $37.0196\text{ }^{\circ}\text{C}$.光能量衰减较快,只有小部分光能够穿过头皮和颅骨被血管和灰质吸收,血管的温度仅从 $37.0000\text{ }^{\circ}\text{C}$ 升到 $37.0029\text{ }^{\circ}\text{C}$,光热效应较弱.在无颅骨的情况下,绝大多数的光能够入射到灰质中,血管能够吸收大部分的能量,温度上升得最高,从 $37.0000\text{ }^{\circ}\text{C}$ 升高到 $37.2012\text{ }^{\circ}\text{C}$,光热效应明显.通过构建鼠脑的光热模型来研究颅骨对脑部光热模型的影响.这有助于人们进一步了解脑部结构以及光与脑组织相互作用的机理,同时也为提高光热治疗的效果提供一定的思路.

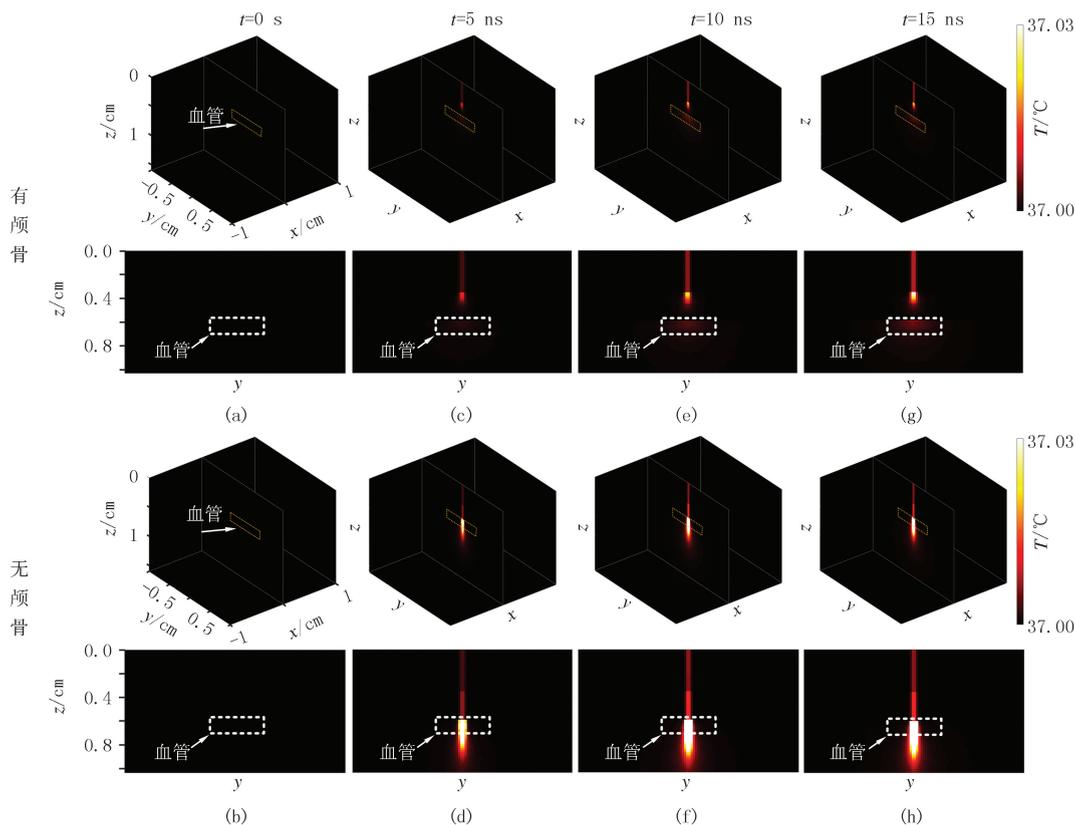


图3 有颅骨和无颅骨时脑部各层温度随时间的变化

Fig.3 The temperature variation of different layers in the brain over time with and without the skull

附录见电子版 (DOI:10.16366/j.cnki.1000-2367.2023.05.11.0001).

参 考 文 献

- [1] VALK S L, HOFFSTAEDTER F, CAMILLERI J A, et al. Personality and local brain structure: their shared genetic basis and reproducibility[J]. *NeuroImage*, 2020, 220: 117067.
- [2] 张闻轩. 基于增强卷积特征的多模态脑瘤图像分类[D]. 南京: 南京理工大学, 2020.
ZHANG W X. Enhancing convolutional features for multi-modality brain tumor image classification[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2020.
- [3] 王翔宇. 基于 SRNP-ResCapsule 网络的脑瘤 MRI 图像分类研究[D]. 长春: 吉林大学, 2021.
WANG X Y. Research of brain tumor MRI image classification based on SRNP-ResCapsule network[D]. Changchun: Jilin University, 2021.
- [4] 李芳. 基于卷积神经网络的 MRI 脑瘤图像分割方法研究[D]. 济南: 山东师范大学, 2019.
LI F. Research on brain tumor segmentation based on convolutional neural network in MRI images[D]. Jinan: Shandong Normal University, 2019.
- [5] 缪昭华. 光热转换纳米粒子的制备及癌症诊疗研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2017.
MIAO Z H. Fabrication of photothermal conversion nanoparticles for cancer theranostics[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2017.

- [6] LOVELL J F, JIN C S, HUYNH E, et al. Porphyrin nanovesicles generated by porphyrin bilayers for use as multimodal biophotonic contrast agents[J]. *Nature Materials*, 2011, 10(4): 324-332.
- [7] GUO B, SHENG Z H, HU D H, et al. Through scalp and skull NIR-II photothermal therapy of deep orthotopic brain tumors with precise photoacoustic imaging guidance[J]. *Advanced Materials*, 2018, 30(35): e1802591.
- [8] SHEN Z Y, LIU T, LI Y, et al. Fenton-reaction-acceleratable magnetic nanoparticles for ferroptosis therapy of orthotopic brain tumors[J]. *ACS Nano*, 2018, 12(11): 11355-11365.
- [9] LI D Y, HU Z W, ZHANG H Q, et al. A Through-Intact-Skull(TIS) chronic window technique for cortical structure and function observation in mice[J]. *eLight*, 2022, 2(1): 15.
- [10] MIAO Z H, HU D H, GAO D Y, et al. Tiny 2D silicon quantum sheets: a brain photonic nanoagent for orthotopic glioma theranostics[J]. *Science Bulletin*, 2021, 66(2): 147-157.
- [11] DUMONT A P, FANG Q Q, PATIL C A. A computationally efficient Monte-Carlo model for biomedical Raman spectroscopy[J]. *Journal of Biophotonics*, 2021, 14(7): e202000377.
- [12] JACQUES S L. History of Monte Carlo modeling of light transport in tissues using mcml.c[J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2022, 27(8): 083002.
- [13] 郭则飞. 蒙特卡罗仿真在漫射光层析成像中的应用[D]. 杭州: 浙江大学, 2013.
- GUO Z F. The application of Monte Carlo simulation in diffuse optical tomography[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2013.
- [14] KIM D, KIM H. Optimization of photothermal therapy treatment effect under various laser irradiation conditions[J]. *International Journal of Molecular Sciences*, 2022, 23(11): 5928.
- [15] JACQUES S, LI T, PRAHI S. mcxyz. c: A 3D Monte Carlo simulation of heterogeneous tissues[EB/OL][2022-11-10]. <https://omlc.org/software/mc/mcxyz/>.
- [16] MARTI D, AASBJERG R N, ANDERSEN P E, et al. MCmatlab: an open-source, user-friendly, MATLAB-integrated three-dimensional Monte Carlo light transport solver with heat diffusion and tissue damage[J]. *Journal of Biomedical Optics*, 2018, 23(12): 1-6.
- [17] SONG X L, TENG A, CHEN H, et al. Finite element simulation of the interaction between pulsed laser and mouse brain[C]//4th Optics Young Scientist Summit(OYSS 2020). Ningbo, SPIE, 2021: 402-407.

Effect of skull on photothermal effect based on Monte Carlo method and finite element method

Song Xianlin^a, You Bokang^a, Li Sihang^b

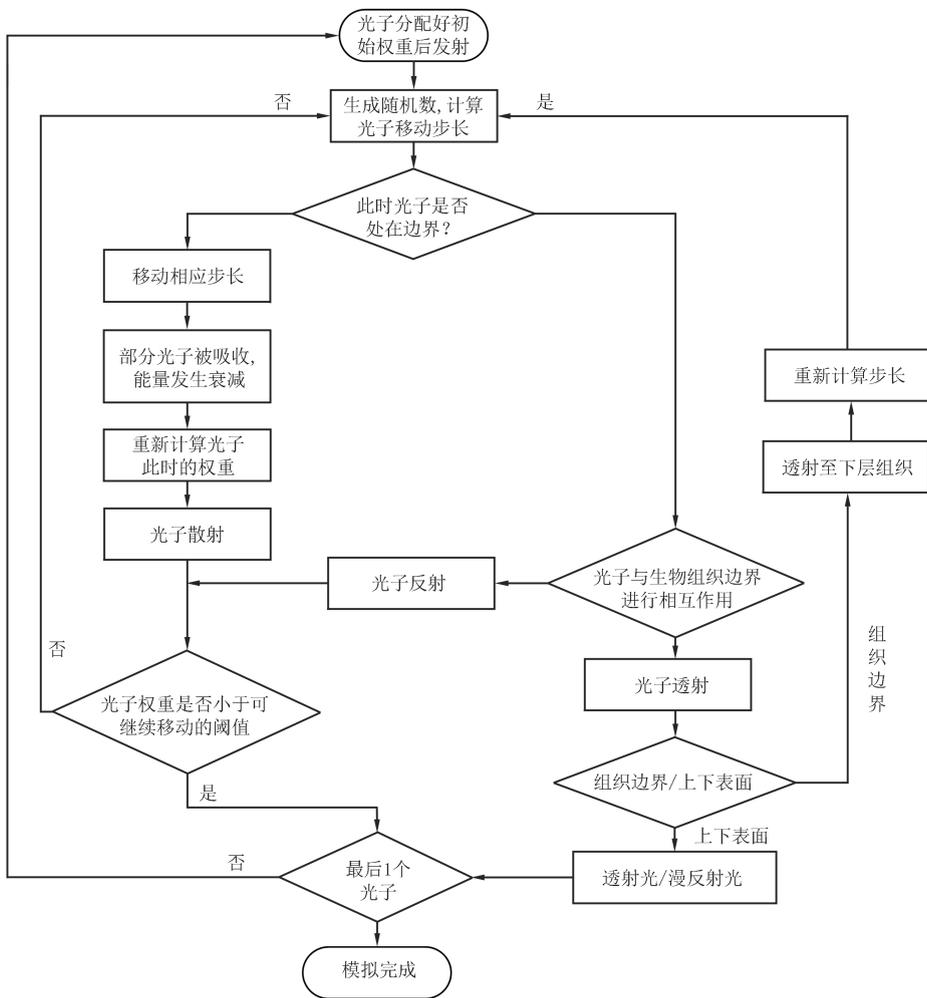
(a. School of Information Engineering; b. Jiluan Academy, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

Abstract: In this study, MCmatlab was used to construct a photothermal model of mouse brain with and without skull, and the effect of skull on brain photothermal effect was studied by Monte Carlo method and finite element method. Monte Carlo method can be used to simulate the propagation of a large number of photons in different brain tissues. Then the finite element method is used to calculate the absorption of light energy by each unit, and the temperature distribution of brain tissue is obtained. The simulation results show that in the case of skull, the light will be absorbed and scattered seriously through the scalp and skull. Only a small part of the photons can be absorbed by blood vessels and gray matter through the scalp and skull, and the photothermal effect is very weak. In the absence of skull, most of the light can enter the gray matter, and the blood vessels can absorb most of the energy, resulting in a significant increase in temperature. Compared with the temperature rise on the blood vessels with skull, the temperature rise on the blood vessels without skull increases by 0.2 °C, and the photothermal effect is obvious.

Keywords: Monte Carlo method; finite element method; skull; photothermal effect; brain imaging

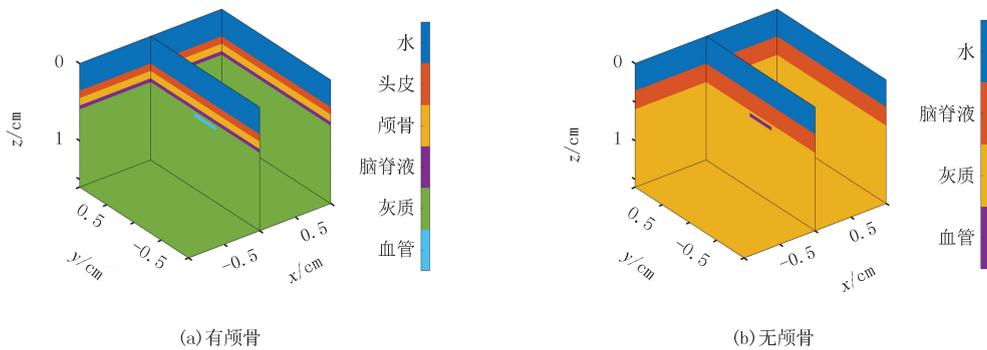
[责任编辑 杨浦 刘洋]

附录



图S1 蒙特卡洛法流程图

Fig.S1 The flowchart of Monte Carlo method



图S2 小鼠脑部结构

Fig.S2 The structure of mouse brain

表 S1 小鼠脑部结构的光学参数

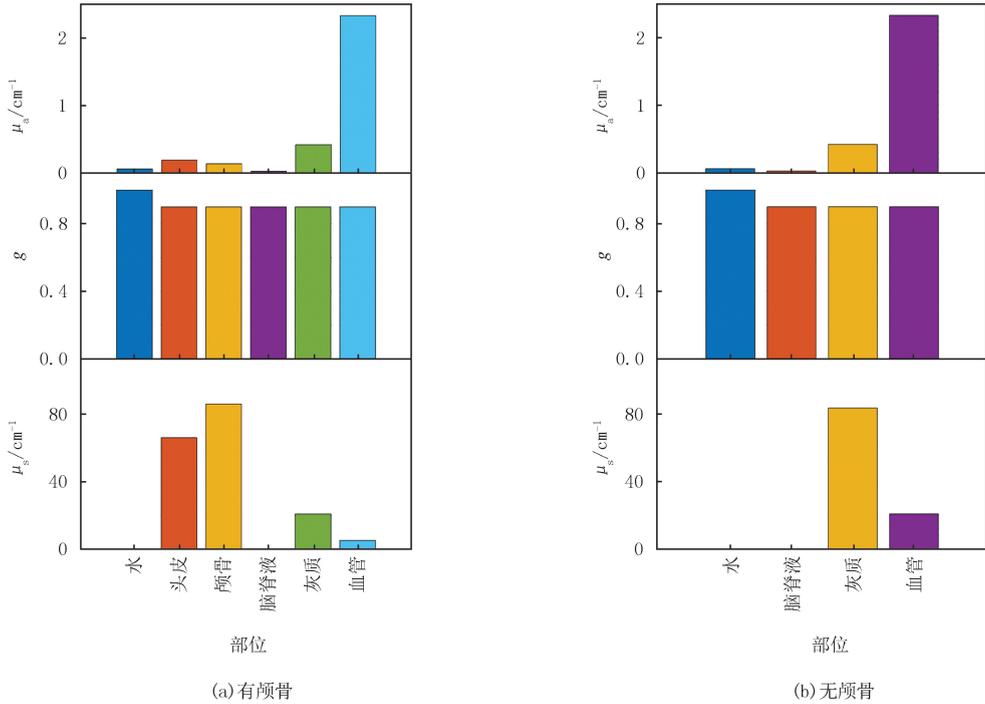
Tab. S1 The optical parameters in the structure of mouse brain

部位	吸收系数 μ_a/cm^{-1}	散射系数 μ_s/cm^{-1}	各向异性系数 g	折射率 n
水	0.060	0.01	1.0	1.33
头皮	0.191	66.00	0.9	1.37
颅骨	0.136	86.00	0.9	1.37
脑脊液	0.026	0.10	0.9	1.37
灰质	0.420	20.90	0.9	1.37
血管	2.330	5.22	0.9	1.37

表 S2 灰质和血管的部分热学参数

Tab. S2 Thermal parameters of gray matter and blood vessel

部位	比热容 $C/(\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{m}^{-3})$	热导率 $k/(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$
灰质	840	0.7
血管	3 639	1.1



图S3 小鼠脑部结构的光学参数

Fig. S3 The optical parameters in the structure of mouse brain