

doi:10.3969/j.issn.1001-3539.2026.01.013

基于深度学习势的凯夫拉纤维/环氧树脂冲击损伤分子动力学模拟

李雅琴^{1,2}, 武慧恩³, 王梓霖⁴, 牛仁骏¹, 尹慧勇¹, 王一清¹, 杨璐霞⁵, 付一政^{1,2}

(1. 中北大学材料科学与工程学院, 太原 030051; 2. 功能高分子复合材料山西省重点实验室, 太原 030051; 3. 陆军装备部驻某地区军事代表室, 太原 030006; 4. 太原理工大学化学与化工学院, 太原 030024; 5. 太原师范学院计算机科学与技术学院, 山西晋中 030619)

摘要:凯夫拉(Kevlar)纤维增强环氧树脂复合材料因为具有良好的抗冲击性能,常应用于抗冲击吸能防护结构。本文结合机器学习,第一性原理与分子动力学方法研究高速冲击载荷下防护材料的动态损伤与破坏机理。首先通过第一性原理分子动力学计算获取数据集,其次通过深度神经网络开发三组分(弹丸/Kevlar纤维/环氧树脂)冲击模型的深度学习势,其兼具第一性原理计算的高精度与经典分子动力学的高效率。最后,构建了大规模金刚石球形弹丸冲击Kevlar纤维/环氧树脂(防护模型)的分子模型,基于深度学习势采用分子动力学模拟方法研究了刚性球形金刚石弹丸以10,20,30,40,50 km/s超高速冲击防护模型的行为,从微观层面分析了冲击过程中防护模型在结构、能量以及损伤演化与破坏行为方面的响应特性。结果表明,弹丸在侵入防护模型后,其运动受到显著阻碍,速度急剧衰减,弹丸初始速度越高,速率衰减越快。当弹丸初速度为10、20 km/s时,弹丸最终滞留在模型内部;而初速度为30、40、50 km/s时弹丸会贯穿整个防护模型,其动能损耗率分别为99.61%、99.54%、99.25%。Kevlar纤维在弹丸冲击下,其内部形成明显空洞;当弹丸滞留在纤维层时,纤维层的损伤面积较小;弹丸穿过纤维层时对纤维造成了较大的损伤,空洞面积较大。

关键词:高速冲击;分子动力学;深度学习势函数;凯夫拉纤维;环氧树脂

中图分类号:O631.2 **文献标识码:**A **文章编号:**1001-3539(2026)01-0099-08

Molecular dynamics simulation of impact damage in kevlar fiber/epoxy composites using deep learning potentials

LI Yaqin^{1,2}, WU Huien³, WANG Zilin⁴, NIU Renjun¹, YIN Huiyong¹, WANG Yiqing¹, YANG Luxia⁵, FU Yizheng^{1,2}

(1. School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China; 2. Shanxi Province Key Laboratory of Functional Polymer Composites, School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China; 3. The Military Representative Office of the Army Equipment Department in a Designated Region, Taiyuan 030006, China; 4. College of Chemistry and Chemical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China; 5. School of Computer Science and Technology, Taiyuan Normal University, Jinzhong 030619, China)

Abstract: Kevlar fiber-reinforced epoxy composites are widely used in impact-resistant and energy-absorbing protective structures due to their excellent impact resistance. Integrating machine learning, first-principles calculations and molecular dynamics, the dynamic damage and failure mechanisms of protective materials under high-speed impact loading were investigated. First, a dataset was obtained through Ab initio molecular dynamics calculations. Subsequently, a deep neural network was employed to develop a deep potential for a three-component (projectile, Kevlar fiber, epoxy) impact model, which combines the high accuracy of first-principles calculations with the high efficiency of classical molecular dynamics. Finally, a large-scale molecular model was constructed to simulate the impact of a spherical diamond projectile on a Kevlar fiber/epoxy composite (protective model). Based on the deep potential, molecular dynamics simulations were performed to study the hypervelocity impact of a rigid spherical diamond projectile on the protective model at speeds of 10, 20, 30, 40 and 50 km/s. The response characteristics of protective models in terms of structure, energy, damage evolution and failure behavior during impact were analyzed at microscopic level. The results show that after the projectile penetrates the protective model, its motion is significantly hindered and its velocity decreases sharply. The higher the initial velocity of the projectile, the faster its velocity decays. When the initial projectile velocities are 10 km/s and 20 km/s, the

通信作者:付一政,博士,副教授,硕士生导师,研究方向为人工智能在高分子材料领域的应用

收稿日期:2025-10-18

引用格式:李雅琴,武慧恩,王梓霖,等.基于深度学习势的凯夫拉纤维/环氧树脂冲击损伤分子动力学模拟[J].工程塑料应用,2026,54(1):99-106.

LI Yaqin, WU Huien, WANG Zilin, et al. Molecular dynamics simulation of impact damage in kevlar fiber/epoxy composites using deep learning potentials[J]. Engineering Plastics Application, 2026, 54(1):99-106.

projectile ultimately remains embedded within the model. In contrast, at initial velocities of 30, 40, 50 km/s, the projectile fully penetrates the protective model, with kinetic energy dissipation rates of 99.61%, 99.54% and 99.25%, respectively. Under projectile impact, noticeable voids form within the Kevlar fiber layer. When the projectile is embedded within the fiber layer, the damage area is relatively small. However, when the projectile penetrates the fiber layer, it causes extensive damage, resulting in a larger void area.

Keywords: high-speed impact ; molecular dynamics ; deep learning potential ; Kevlar fiber ; epoxy resin

芳纶纤维, 又称作芳香族聚酰胺纤维。该材料不仅具备优异的热稳定性与耐腐蚀性, 同时还具有高抗冲以及高弹性模量等性能, 是“世界三大高性能纤维”之一^[1-2]。芳纶复合材料具有高比强度、比刚度以及良好的抗冲击性能, 能够制备出较为轻薄、灵活的防护装备^[3]。聚对苯二甲酰对苯二胺(PPTA, 商品名 Kevlar)纤维是防弹复合材料常用到的芳纶纤维, 能应对高速弹道冲击, 被用于制备安全头盔、军用头盔、防弹衣和防弹板等^[4-6]。因此, 研究 Kevlar 纤维增强环氧树脂防弹复合材料在高速碰撞下的动态损伤与破坏机理具有极其重要的科学意义与应用价值。

实验研究受限于冲击过程的高速瞬态特性, 在观测和分析方面存在诸多瓶颈。因此, 分子动力学(MD)模拟作为一种能揭示原子/分子微观相互作用机理的工具, 已成为探究材料微观结构演化行为与机制的重要手段。Yang 等^[7]通过 MD 模拟研究了冲击载荷下单晶铝(Al)不同晶体取向的散裂行为, 揭示了冲击加载过程冲击波传播和微观结构演化过程。Li 等^[8]通过 MD 模拟研究了冲击载荷条件下纳米晶 SiC 的塑性、相变和动态损伤/断裂过程, 揭示了纳米晶 SiC 陶瓷在高应变速率下力学性能的晶粒尺寸依赖性。袁海杰等^[9]通过 MD 模拟研究了超高速冲击下石墨烯增强环氧树脂的结构、能量、动态损伤与破坏行为的变化情况。He 等^[10]通过 MD 模拟研究了石墨烯(氧化石墨烯)/水合硅酸钙复合材料在冲击压缩载荷下的力学响应, 揭示了不同冲击速度下的微观变形机理。

目前常用的 MD 模拟方法有第一性原理分子动力学(AIMD)方法和传统分子动力学(CMD)方法。其中, AIMD 方法通过近似求解薛定谔方程保证了较高的计算精度, 但却带来了巨大的计算需求, 其应用限制在小体系范围内。相比之下, CMD 模拟通过“半经验”或“经验”的简单物理函数描述原子间相互作用, 通过数值积分牛顿运动方程, 求解体系在特定初始状态下的运动轨迹, 可以实现高效率的大尺度模拟计算, 但其计算精度逊色于 AIMD。

将机器学习融入第一性原理与分子动力学为克服传统计算方法固有的挑战提供了新的途径, 即利用 AIMD 的计算结果数据作为训练集, 通过机器学习方法训练开发机器学习势。目前, 常见的机器学习势函数主要包括高斯近似势^[11]、高维神经网络势^[12]、矩张量势^[13]以及深度学习势(DP)^[14]等。DP 的成功开发, 极大地推动了计算模拟在材料科学领域的深入应用, 它已被成功应用于解决一系列关键科学问题, 例如材料的失效机理^[15]、材料特性^[16-17]、含能材料燃烧爆炸^[18-20]机理等, 成为连接第一性原理精度与经典分子动力学效率的重要桥梁。

基于此, 笔者开发了具有第一性原理计算精度的 DP 模型, 并应用深度学习分子动力学(DPMD)方法研究了不同冲击速度下 Kevlar 纤维增强环氧树脂复合材料的损伤与能量吸收特性, 揭示其抗冲击机理, 为高性能防护材料的发展提供指导。

1 模拟方法

1.1 势函数开发

1.1.1 数据集构建

利用深度神经网络构建势函数需要从 AIMD 计算中提取原子坐标、作用力(F)和能量(E)来构建初始训练数据集, 构建数据集的结构包括金刚石弹丸、交联环氧树脂[由双酚 A 二缩水甘油醚(DGEBA)预聚物与 4,4-二氨基二苯砜(DDS)固化剂组成^[9], 其分子模型如图 1a、图 1b 所示]、Kevlar 纤维(如图 1c)两两组合而成的弹丸/Kevlar 纤维、弹丸/交联环氧树脂、Kevlar 纤维/交联环氧树脂三种复合体系模型。弹丸/Kevlar 纤维、弹丸/环氧树脂复合体系中, 分别赋予弹丸 5、10、20、30、40、50 km/s 的初速度, 在 NVE 系综下进行 AIMD 冲击模拟, 模拟时间根据弹丸速度的不同而略有差别; Kevlar 纤维/环氧树脂模型分别在 NVE、NVT 系综下进行 5 000 步 AIMD 模拟。得到包含 15 000 个结构的数据集, 其中 80% 作为训练集, 20% 作为测试集。所有计算均在 CP2K^[21]中进行, 在 AIMD 计算中采用 GTH 赝势处理体系的核心电子, 结合 PBE 泛函广义梯度近似方法来描述交换关联泛函, 并通过 Grimme DFT-D3 方法处理色

散相互作用。

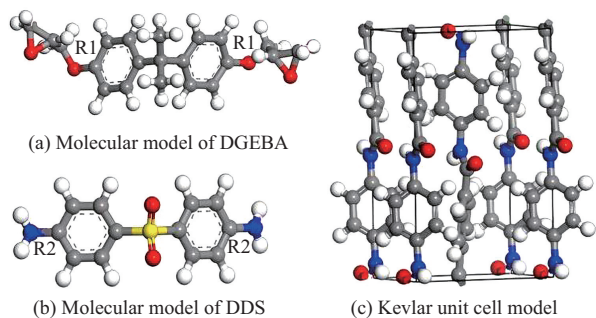


图1 DGEBA、DDS、Kevlar分子模型

Fig. 1 Molecular models of DGEBA, DDS and Kevlar

1.1.2 训练参数

采用Deep MD-kit^[22]软件包训练深度学习势,嵌入网络和拟合网络的规模分别为{25, 50, 100}和{240, 240, 240}。径向截止设置为6.0 Å,平滑截止设置为0.5 Å。采用Adam随机梯度下降法对模型进行训练,训练过程的损失函数定义见式(1)。

$$L(p_e, p_f, p_\xi) = p_e |\Delta e|^2 + \frac{p_f}{3n} \sum_i |\Delta F_i|^2 + \frac{p_\xi}{9} \|\Delta \xi\|^2 \quad (1)$$

式中: n 为原子数目; e 为单个原子能量; F_i 是第 i 个原子的受力信息; ξ 为维里应力张量; Δ 代表训练集数据与DP模型预测值间的偏差; p_e 、 p_f 和 p_ξ 分别代表能量项、受力项及维里项的可调前置因子^[17],在训练过程中 p_e 从0.02增加到1, p_f 从1 000减小到1, p_ξ 从0.2增加到1。DP训练共经过 1.0×10^6 次迭代,学习率从 1.0×10^{-3} 到 3.5×10^{-8} 呈指数衰减,衰减步长为5 000。

1.2 冲击模型构建

通过PPTA晶胞扩胞得到Kevlar纤维层模型,如图2a所示。通过Perl脚本在Material studio分子模拟软件中进行了DGEBA与DDS的交联反应模拟,反应的初始截断半径为3.5 Å,最大截断半径设置为12.5 Å,步长为0.5 Å,选用COMPASS作为力场采用Atom-based方法计算范德华作用力,Ewald方法计算静电作用力,得到的交联环氧树脂模型如图2b所示,其他详细模拟过程参考本课题组DGEBA与DDS交联反应的相关工作^[9]。随后,构建上、下层为Kevlar纤维层、中间层为交联环氧树脂的层状复合初始模型。因交联环氧树脂模型表面存在突出分子链末端,与纤维复合时,易在界面处引入较多空隙。为减少此类缺陷,对顶层与底层纤维同时施加垂直压力将模型进行压缩,直至模型厚

度趋于稳定^[9]。随后移除底层纤维,最终获得结构致密且包含18 470个原子的Kevlar纤维/环氧树脂复合层模型,其中Kevlar纤维质量分数为32.91%。对层模型进行能量最小化和DPMD平衡弛豫处理,即分别在NVE、NVT(使用Langevin方法控制温度维持在300 K)系综下进行500 ps的热力学弛豫,最终的层模型如图2c所示,称为防护模型,其中Kevlar纤维层厚度为20.32 Å,树脂层厚度为45.34 Å。

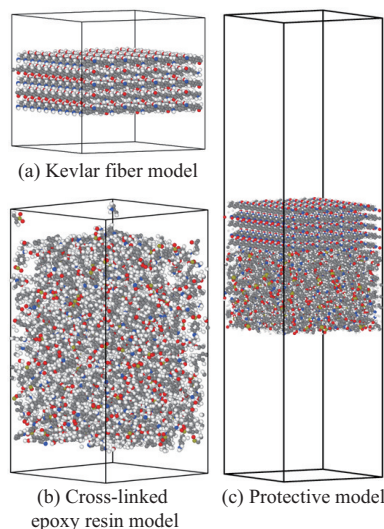


图2 Kevlar纤维、交联环氧树脂模型与防护模型

Fig. 2 Model of Kevlar fiber, cross-linked epoxy resin and protective model

防护模型构建及冲击模拟均在由美国能源部下属的Sandia国家实验室开发的大规模原子/分子并行模拟器(LAMMPS)^[23]分子模拟软件上进行。在防护模型正上方构建一个直径为10 Å的金刚石球形弹丸模型,两者共同组成冲击模拟体系,如图3所示。模拟过程中将防护模型划分为边界层、恒温层和牛顿层^[9],边界层中的原子被固定在其平衡位置,用于模拟边界条件,这有助于减小边界效应。恒温层采用Nose-Hoover热浴方法(NVT系综),通过体系与热浴环境之间的能量交换来实现温度控制。牛顿层(亦称自由变形层)中的原子服从牛顿运动定律,该层用于建立和求解相应的微分方程,采用NVE系综。弹丸视为刚体,分别以10、20、30、40、50 km/s的速度进行超高速冲击。MD模拟在周期性边界条件下进行,积分时间步长为0.1 fs,系统温度为300 K。

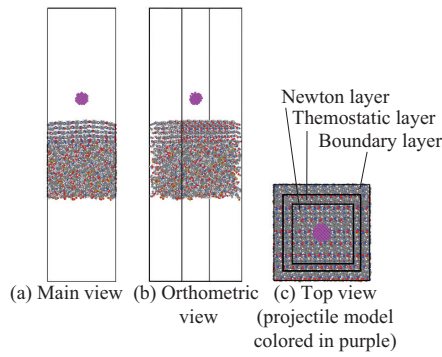


图3 冲击模拟体系模型

Fig. 3 Impact simulation system model

2 结果与讨论

2.1 势函数验证

表1为深度学习势预测结果与AIMD计算结果之间的均方根误差(RMSE)。在本工作中,使用第一性原理计算数据库对势函数进行准确性测试,如图4所示,通过对比三个体系中深度学习势函数对能

表1 深度学习势预测结果与AIMD计算结果之间的RMSE

Tab. 1 RMSE between DP prediction results and AIMD

Model	calculation results		
	Energy RMSE/ ($\text{eV} \cdot \text{atom}^{-1}$)	Force RMSE/ ($\text{eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$)	Virial RMSE/ ($\text{eV} \cdot \text{atom}^{-1}$)
Projectile/Kevlar fiber	0.023 1	0.761 5	0.051 1
Projectile/Cross-linked epoxy resin	0.038 0	0.742 6	0.051 2
Kevlar fiber/Cross-linked epoxy resin	0.002 5	0.197 2	0.007 5

量、原子受力以及维里的预测值与第一性原理计算的参考值,可见所有数据点均紧密分布于参考线 $y=x$ 两侧,表明深度学习势函数在能量、力和维里方面均与第一性原理结果高度一致。此外,表1列出了不同体系能量、原子受力和维里的RMSE,所有体系能量的RMSE均小于 0.04 eV/atom ,受力的RMSE均小于 0.8 eV/\AA ,维里应力的RMSE均小于 0.06 eV/atom ,进一步证实了深度学习势函数的可靠性。

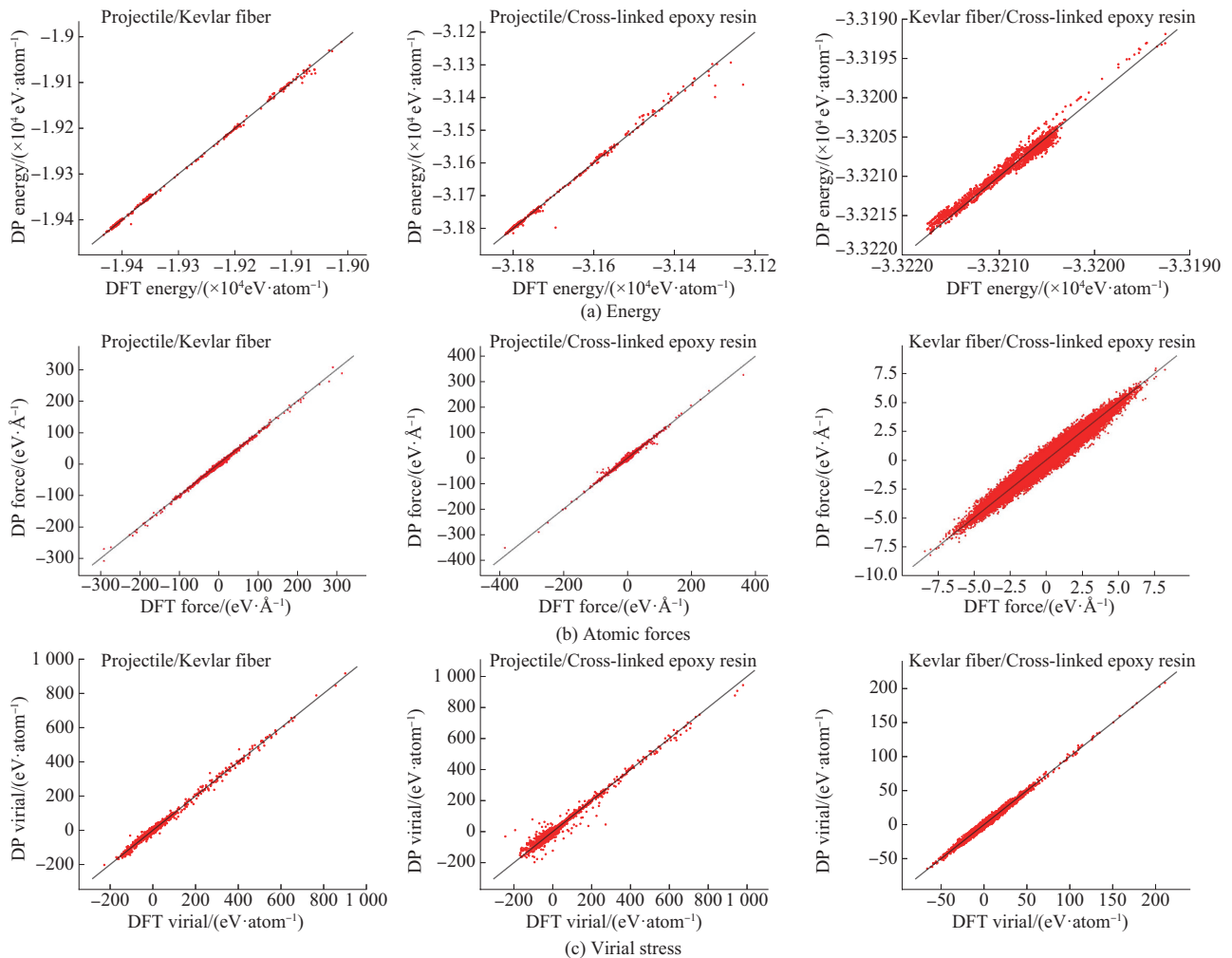


图4 深度学习势函数的能量、受力和维里应力精度测试

Fig. 4 Accuracy test of DP on energy, atomic forces and virial stress

2.2 弹丸速度和位移在冲击过程中的变化情况

采用新开发的深度学习势开展了金刚石弹丸冲击 Kevlar 纤维增强环氧树脂防护材料的分子动力学模拟。刚性弹丸在接触防护模型前速度维持不变,因此,将其与防护模型接触的瞬间定义为模拟的初始时刻($t=0$)并以此作为后续分析的起点。图 5 和图 6 分别给出了弹丸速度和侵入防护模型的距离随模拟时间的变化情况。图 7 为高速冲击下防护模型不同时刻的结构状态。由图 5 可见,弹丸撞击防护模型后,受到来自 Kevlar 纤维的阻碍,速度急速下降,初始速度越大,速度的下降也越快,表明弹丸受到的阻力也越大。当弹丸以 10 km/s 的速度侵入防护模型时,由于能量太小不足以冲穿防护模型的 Kevlar 纤维层,由图 6 可见在 0.914 ps 时弹丸侵入

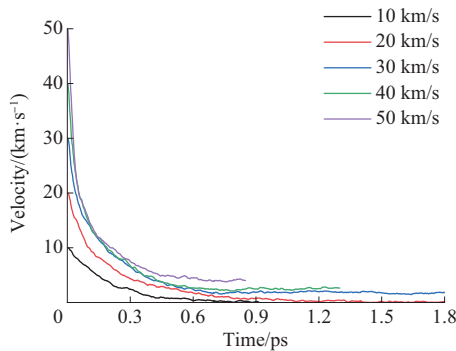


图 5 不同初始速度下弹丸速度随时间的变化曲线

Fig. 5 Variation curves of projectile velocity with time at different initial speeds

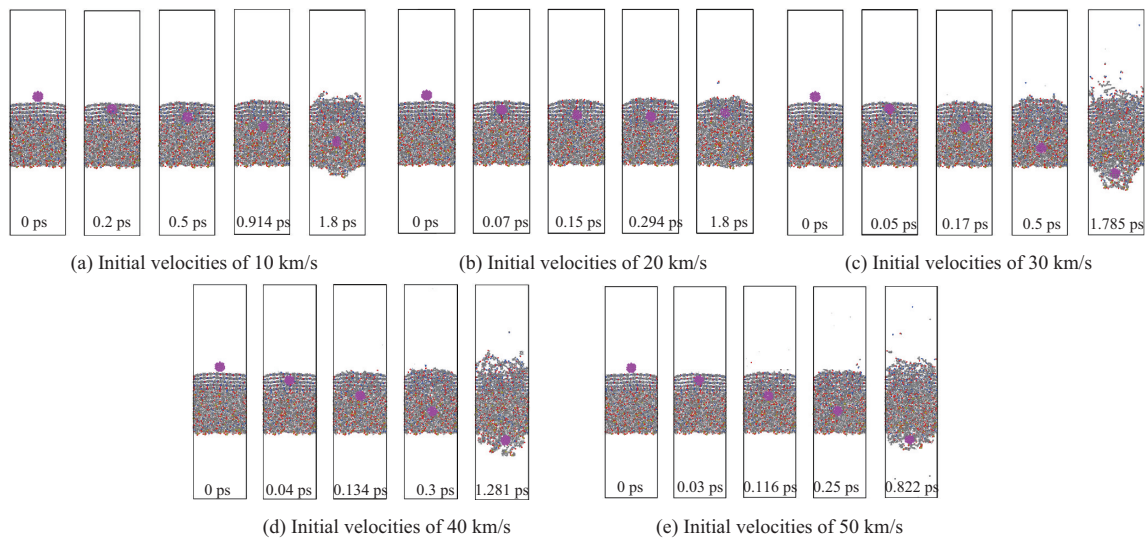


图 7 高速冲击下防护模型不同时刻的结构状态

Fig. 7 Structural configurations of protective model at different times during high-speed impact

2.3 弹丸的动能损耗

基于刚性球体的弹丸假设,其冲击过程中的能量损耗仅来源于与防护模型的相互作用。由能量守

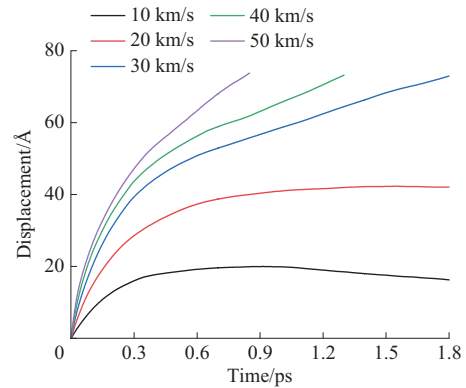


图 6 不同初始速度下弹丸侵入距离随时间的变化曲线

Fig. 6 Variation curves of projectile penetration distance with time at different initial speeds

恒定律可知,弹丸动能的所有损失将转化为防护模型的能量吸收。因此,通过监测弹丸动能的衰减过程,即可直接针对防护模型进行吸能效能评估。图 8

纤维的深度为 19.99 Å,之后出现反弹现象,侵入距离值开始下降,速度方向也发生改变,直到模拟结束弹丸滞留在纤维层(如图 7a 所示);弹丸以 20 km/s 的速度侵入时,速度增大能量增加,经 0.294 ps 穿透 Kevlar 纤维层,但不足以冲出环氧树脂层,最终停留在树脂中(如图 7b 所示),其侵入防护模型的最大距离为 42.05 Å;进一步增大弹丸的侵入速度到 30、40、50 km/s,弹丸的能量增加,经 0.17、0.134、0.116 ps 以 10.69、12.34、13.98 km/s 的速度穿透 Kevlar 纤维层进入环氧树脂层,最终分别在 1.785、1.281、0.822 ps 以 1.49、2.58、3.86 km/s 的速度完全冲穿防护模型(如图 7c~图 7e 所示)。

展示了不同初始速度下弹丸动能(K_i)随时间演化的曲线,展示了动能通过使模型发生损伤、变形而被吸收和耗散的过程。可以观察到,弹丸的初始速度越高,其携带的动能也越大,在侵入防护模型后,弹丸需要克服模型的阻力做功,其动能随之显著降低。图9统计了不同速度下弹丸的初始动能、剩余动能:当弹丸滞留在防护模型内部时,其动能几乎全部损耗;当弹丸侵入速度为30、40、50 km/s时贯穿防护模型,动能损耗率分别为99.61%、99.54%、99.25%。

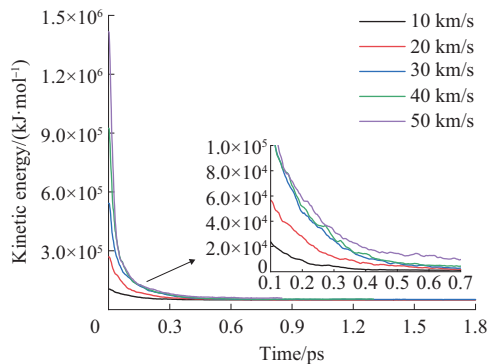


图8 不同初始速度下弹丸动能随时间的变化曲线

Fig. 8 Variation curves of projectile kinetic energy with time at different initial speeds

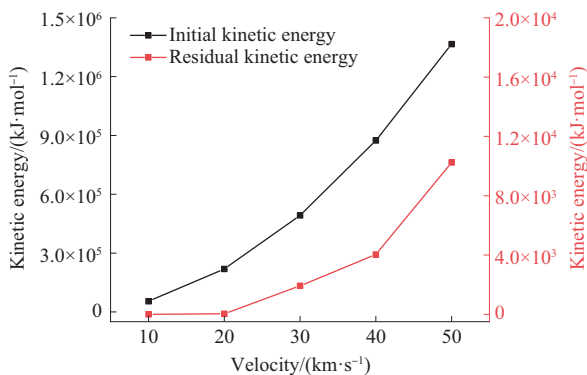


图9 弹丸的动能损失

Fig. 9 Kinetic energy loss of projectile

2.4 Kevlar纤维层损伤及能量变化

在弹丸的冲击作用下,Kevlar纤维层结构会受到损伤破坏,如图10所示,主要为弹丸正下方的局部剪切破坏,相貌为与弹丸形状相似的空洞,与文献[24]中观察到的实验现象一致。Kevlar纤维结构变化时势能(P_c)和动能 K_c 的变化是消耗弹丸动能的主要途径,图11展示了 P_c 和 K_c 的变化过程。冲击速度为10 km/s时,弹丸未能冲穿Kevlar纤维层,其损伤较小,空洞面积小,能量的变化幅度较小。当冲击速度为20、30、40、50 km/s时,弹丸穿过Kevlar纤维层,对其造成了较大损伤,空洞面积较大,能量变

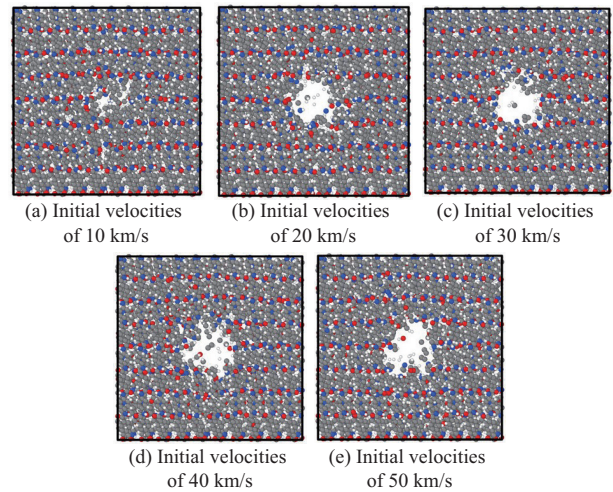


图10 Kevlar纤维层损伤快照

Fig. 10 Snapshot of damage in Kevlar fiber layer

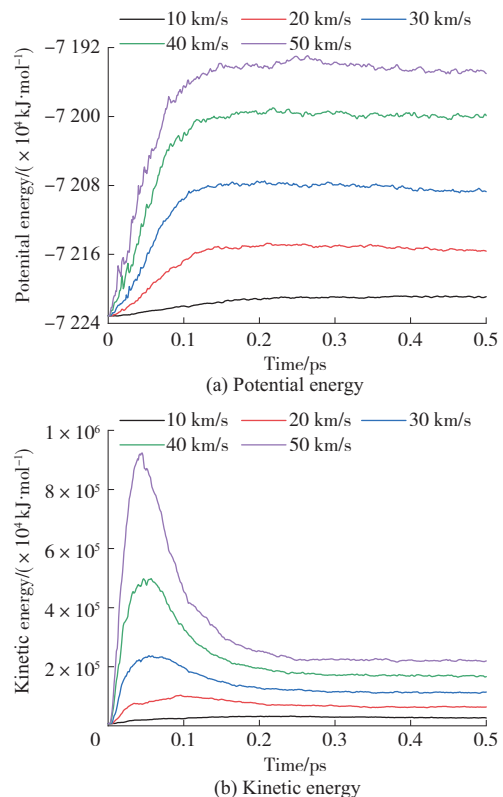


图11 不同初始速度时Kevlar纤维层能量随时间变化曲线

Fig. 11 Variation curves of total energy in Kevlar fiber layer with time at different initial speeds

化幅度较大,其能量变化大致分为三个阶段:第一阶段受到弹丸撞击之后原子运动加剧,其化学键发生形变,动能和势能增加,弹丸的速度越高携带的能量越大,纤维层的动能和势能增加越快,增量越高;第二阶段,Kevlar纤维内部结构形变达到一定程度化学键开始发生断裂,动能下降,势能继续增大;第三阶段,弹丸离开Kevlar纤维层,其势能和动能

趋于不变。

3 结论

(1)基于第一性原理计算构建的数据集,通过深度神经网络开发了三组分冲击体系的深度学习势;相比于AIMD计算,该势函数所计算体系能量的RMSE均小于0.04 eV/atom,受力的RMSE均小于0.8 eV/Å,维里的RMSE均小于0.06 eV/atom,能够准确描述不同组分间的相互作用。

(2)建立了Kevlar纤维/交联环氧树脂复合材料防护模型,基于深度学习势进行了金刚石弹丸以不同速度冲击防护模型的DPMD模拟。

(3)弹丸撞击防护模型后,运动受到显著阻碍并伴随速度的急剧衰减,弹丸初速度越高,冲击过程中速度衰减速率越快。低速(10、20 km/s)冲击条件下,弹丸最终滞留在模型内部;而在高速(30、40、50 km/s)冲击下则出现贯穿现象。

(4)弹丸动能受防护模型作用迅速耗散,在低速冲击条件下,弹丸滞留在防护模型内部动能几乎全部损耗。弹丸以30、40、50 km/s的速度贯穿防护模型后,其动能损耗率分别为99.61%、99.54%、99.25%。

(5)模拟捕捉到Kevlar纤维的损伤情况,在弹丸冲击下,其内部形成明显空洞;当弹丸滞留在纤维层时,纤维层的损伤面积较小;弹丸穿过纤维层时对纤维造成了较大的损伤,空洞面积较大。

参考文献

- [1] 朱露,李强,蔡永飞,等.芳纶-EPS复合结构抗冲击性能研究[J].上海塑料,2024,52(6):21-24.
ZHU Lu, LI Qiang, CAI Yongfei, et al. Research on the impact resistance of aramid-EPS composite structure[J]. Shanghai Plastics, 2024, 52(6):21-24.
- [2] 孟花,张燕,刘永佳,等.高性能防弹防刺材料研究进展[J].纺织科技进展,2024(8):13-16,66.
MENG Hua, ZHANG Yan, LIU Yongjia, et al. Research progress in high-performance bulletproof and stab proof materials[J]. Progress in Textile Science & Technology, 2024(8):13-16, 66.
- [3] 张岩,徐兴亚,郭雁,等.高性能纤维增强抗弹复合材料的研究与应用进展[J].工程塑料应用,2024,52(8):190-196.
ZHANG Yan, XU Xingya, GUO Yan, et al. Research and application progress of high performance fiber reinforced ballistic composites[J]. Engineering Plastics Application, 2024, 52(8):190-196.
- [4] 范志平,靳高岭.芳纶/碳纤维混杂增强树脂复合材料的抗冲击性能[J].合成纤维,2022,51(7):66-71.
FAN Zhiping, JIN Gaoling. Impact resistance performance of aramid fiber/carbon fiber hybrid reinforced resin composites[J]. Synthetic Fiber in China, 2022, 51(7):66-71.
- [5] VARA PRASAD V, TALUPULA S. A review on reinforcement of basalt and aramid (kevlar 129) fibers[J]. Materials Today: Proceedings, 2018, 5(2):5 993-5 998.
- [6] SAFRI S N A, SULTAN M T H, JAWAID M, et al. Impact behaviour of hybrid composites for structural applications: A review[J]. Composites Part B:Engineering, 2018, 133:112-121.
- [7] YANG X Y, ZHANG R Z, WU D, et al. Molecular dynamics simulation study on orientation effects on the shock-induced spallation of single-crystal aluminum[J]. Materials Today Communications, 2025, 44. DOI:10.1016/j.mtcomm.2025.111931.
- [8] LI W H, HAHN E N, YAO X H, et al. On the grain size dependence of shock responses in nanocrystalline sic ceramics at high strain rates[J]. Acta Materialia, 2020, 200:632-651.
- [9] 袁海杰,曹英,韩登佳,等.超高速冲击下石墨增强环氧树脂的分子动力学模拟[J].工程塑料应用,2025,53(1):140-145.
YUAN Haijie, CAO Ying, HAN Dengjia, et al. Molecular dynamics simulation of graphene-reinforced epoxy resin under ultra-high-speed impact[J]. Engineering Plastics Application, 2025, 53(1): 140-145.
- [10] HE J L, ARAB A, ZHANG C W. Molecular dynamics simulation of impact compression of Gr(GO)/C-S-H composites[J]. Materials Science and Engineering: B, 2025, 318. DOI: 10.1016/j.mseb. 2025.118267.
- [11] BARTÓK A P, PAYNE M C, KONDOR R, et al. Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons[J]. Physical Review Letters, 2010, 104(13). DOI:10.1103/PhysRevLett.104.136403.
- [12] BEHLER J. Atom-centered symmetry functions for constructing high-dimensional neural network potentials[J]. The Journal of Chemical Physics, 2011, 134(7). DOI:10.1063/1.3553717.
- [13] NOVIKOV I S, GUBAEV K, PODRYABINKIN E V, et al. The MLIP package: Moment tensor potentials with MPI and active learning[J]. Machine Learning: Science and Technology, 2021, 2 (2). DOI:10.1088/2632-2153/abc9fe.
- [14] ZHANG L F, HAN J Q, WANG H, et al. Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics[J]. Physical Review Letters, 2018, 120(14). DOI: 10.1103/PhysRevLett.120.143001.
- [15] LIU L, ZHOU J, SHI J F, et al. The mechanical anisotropy and failure mechanism of poly(p-phenylene terephthalamide) using machine learning molecular dynamics simulations[J]. Macromolecules, 2024, 57(15):6 941-6 953.
- [16] 李君,宋佳和,季伟,等.碳化硼陶瓷动态力学行为与延展性增强机制的深度势能分子动力学研究进展[J].高压物理学报, 2025, 39(11):19-38.
LI Jun, SONG Jiahe, JI Wei, et al. Dynamical mechanical behaviors and enhanced ductility mechanisms of boron carbide based on deep potential molecular dynamics simulations[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2025, 39(11):19-38.

- [17] 李志强,谭晓瑜,段忻磊,等. 氮化硅微波高温介电函数深度学习分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2022, 71(24):405–413.
LI Zhiqiang, TAN Xiaoyu, DUAN Xinlei, et al. Deep learning molecular dynamics simulation on microwave high-temperature dielectric function of silicon nitride[J]. *Acta Physica Sinica*, 2022, 71(24):405–413.
- [18] CHU Q Z, CHANG X Y, MA K, et al. Revealing the thermal decomposition mechanism of RDX crystals by a neural network potential[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2022, 24(42): 25 885–25 894.
- [19] 初庆钊,付小龙,郑学明,等. HTPB/Al/AP/RDX推进剂初始燃烧的分子模拟[J]. 火炸药学报, 2024, 47(3):254–261.
CHU Qingzhao, FU Xiaolong, ZHENG Xueming, et al. Molecular simulations of HTPB/Al/AP/RDX propellants combustion[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2024, 47(3): 254–261.
- [20] PANG K H, WEN M J, CHANG X Y, et al. The thermal decomposition mechanism of RDX/AP composites: Ab initio neural network MD simulations[J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2024, 26(15):11 545–11 557.
- [21] KÜHNE T D, IANNUZZI M, DEL BEN M, et al. CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package-Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2020, 152(19). DOI: 10.1063/5.0007045.
- [22] WANG H, ZHANG L F, HAN J Q, et al. DeePMD-kit: A deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics[J]. *Computer Physics Communications*, 2018, 228:178–184.
- [23] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1–19.
- [24] 闫卫星,郭艳文,徐柠浩,等. Kevlar纤维UD片材复合材料的防弹性能[J]. 复合材料学报, 2025, 42(1):272–282.
YAN Weixing, GUO Yanwen, XU Ninghao, et al. Ballistic performance of Kevlar fiber UD sheets composite materials[J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2025, 42(1):272–282.

(上接第98页)

- [20] 吴青青,王虎杰,康洋涛. 色母对玻纤增强PBT激光吸收特性及打标效果的影响[J]. 工程塑料应用, 2023, 51(5):141–146.
WU Qingqing, WANG Hujie, KANG Yangtao. Effect of masterbatch on laser absorption and laser marking of glass fiber reinforced PBT[J]. *Engineering Plastics Application*, 2023, 51(5): 141–146.
- [21] 王薇,宁雪梅,刘俊峰,等. 基于 $Sb_2O_3@SnO_2$ 协同接枝PA6红外吸收的性能研究[J]. 四川师范大学学报(自然科学版), 2025, 48(3):362–366.
WANG Wei, NING Xuemei, LIU Junfeng, et al. Performance study on infrared absorption of PA6Based on $Sb_2O_3@SnO_2$ co-grafting[J]. *Journal of Sichuan Normal University (Natural Science)*, 2025, 48(3):362–366.
- [22] 杨菁菁,欧军飞,向萌,等. 聚偏氟乙烯/三氧化二锑复合材料的制备及其激光标记性能研究[J]. 塑料科技, 2022, 50(1):49–52.
YANG Jingjing, OU Junfei, XIANG Meng, et al. Study on preparation of polyvinylidene fluoride/antimony trioxide composite material and its laser marking performance[J]. *Plastics Science and Technology*, 2022, 50(1):49–52.
- [23] 张东亮,马晓敏,李红莲,等. 纳米ATO/PVB隔热透明原位复合材料的制备及性能[J]. 复合材料学报, 2013, 30(5):41–48.
ZHANG Dongliang, MA Xiaomin, LI Honglian, et al. Preparation and properties of heat-insulated and transparent nano-ATO/PVB in situ composites[J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2013, 30(5): 41–48.
- [24] 张靖漓,李标荣. 新型铋酸镉半导瓷 $Cd_6Sb_2O_{10}$ 的相变[J]. 压电与声光, 1988, 10(4):15–17.
ZHANG Jingli, LI Biaorong. Phase transitions of $Cd_6Sb_2O_{10}$ semi-conductive ceramics[J]. *Piezoelectrics & Acoustooptics*, 1988, 10(4):15–17.
- [25] CAVUSOGLU O. The 3D surface morphological investigation of laser cutting process of 2024-T3 aluminum alloy sheet[J]. *Optik*, 2021, 238. DOI:10.1016/j.ijleo.2021.166739.
- [26] 孙文博,信春玲,何亚东,等. 玻璃纤维增强PBT微发泡工艺对其制品泡孔结构的影响[J]. 中国塑料, 2022, 36(5):1–7.
SUN Wenbo, XIN Chunling, HE Yadong, et al. Influence of microfoaming injection molding process on cell structure of glass-fiber-reinforced PBT products[J]. *China Plastics*, 2022, 36(5):1–7.