

ВПЛИВ МЕТОДІВ СТАТИСТИЧНОГО АНАЛІЗУ НА ПРОГНОЗУВАННЯ МІКРОСТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ ВИСОКОМІЦНИХ НИЗЬКОЛЕГОВАНИХ СТАЛЕЙ

В.А. Костін

ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України. 03150, м. Київ, вул. Казимира Малевича, 11

РЕФЕРАТ

Стаття представляє комплексний статистичний аналіз властивостей високоміцних низьколегованих сталей (HSLA, HSA, SSHA, ASSHA) на основі широкої бази даних. Використовуючи сучасні методи аналізу даних, включаючи кореляційний аналіз, головні компоненти (PCA), а також машинне навчання (Random Forest, XGBoost) та інтерпретовані метрики SHAP, досліджено взаємозв'язок між хімічним складом, мікроструктурою і механічними властивостями сталей. Для кожної групи сталей виявлені ключові елементи і параметри, що надають максимально вплив на міцність, пластичність і термічну стійкість. Обґрунтовано оптимальні діапазони вмісту C, Nb, V, Ni, а також режими термообробки, включаючи температуру аустенізації та швидкість охолодження. Результати демонструють, що комплексне управління складом і термообробкою дозволяє створювати сталі з чудовим балансом експлуатаційних характеристик. У розділі практичних рекомендацій представлені конкретні поради для металургійного проектування нових сталей, включаючи використання моделей машинного навчання для прискорення розробки та оптимізації сплавів. У роботі також обговорюються наукові прогалини, такі як необхідність стандартизації даних, вивчення комплексних взаємодій легуючих елементів, динаміки фазових перетворень та перспективи впровадження ШІ-методів. Бібліогр. 12, рис. 8.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: високоміцні низьколеговані сталі, статистичний, кореляційний, кластерний аналізи, машинне навчання, мікроструктура, прогнозування властивостей

ВСТУП

Високоміцні низьколеговані сталі HSLA (High-Strength Low-Alloy) та їх сучасні модифікації, зокрема високоміцні сталі з покращеними властивостями HSA (High-Strength Alloy), надвисокоміцні сталі SSHA (Super-Strength High-Alloy) і вдосконалені надвисокоміцні сталі ASSHA (Advanced Super-Strength High-Alloy), відіграють ключову роль у розвитку сучасної металургії та машинобудування. Завдяки поєднанню високої міцності, задовільної пластичності та підвищеної корозійної стійкості ці матеріали набули широкого застосування в аерокосмічній, автомобільній та будівельній галузях, де критично важливими є вагові характеристики та довговічність конструкцій [1, 2].

Процеси зварювання високоміцних сталей, таких як HSA, SSHA та ASSHA, супроводжуються значними технологічними викликами. Зокрема, необхідним є точний контроль режимів нагріву та охолодження для збереження вихідних механічних характеристик. Основними проблемами виступають утворення холодних тріщин і погіршення структури в зоні термічного впливу, що зумовлене високими швидкостями охолодження та складним хімічним складом матеріалу. У таких сталях широко застосовуються легувальні елементи (Mn, Ni,

Cr, Mo), а також мікролегувальні добавки (Nb, Ti, Zr, N, B), які формують дисперсні карбіди та карбонітриди, що суттєво впливають на кінетику розпаду переохолодженого аустеніту та формування остаточної мікроструктури зварного шва.

З метою запобігання формуванню хімічної та структурної неоднорідності, пор, мікротріщин та інших дефектів, критично важливим є раціональний вибір параметрів зварювання: температура попереднього підігріву, швидкість переміщення дуги, режими охолодження. Особливу увагу слід приділяти мінімізації залишкових напружень, які є потенційним джерелом зародження мікротріщин і подальшого руйнування конструкції. Контроль складу шва та обмеження тепловкладення дають змогу зберегти високий рівень міцності, пластичності та ударної в'язкості після зварювання.

Для забезпечення сумісності з основним металом при зварюванні сталей HSA, SSHA та ASSHA рекомендовано використовувати низьковуглецеві присадкові матеріали. Леговані присадки з вмістом нікелю та хрому сприяють збереженню міцності та в'язкості в зоні термічного впливу. Доцільно підтримувати оптимальний фазовий баланс між аустенітною та мартенситною складовими шва, що забезпечує бажаний комплекс механічних властивостей.

Найбільш ефективними методами зварювання для цих сталей є аргонодугове зварювання (TIG) та

Авторське право © Автор(и)

© Видавець ТОВ «ВИДАВНИЧИЙ ДІМ» ПАТОН», 2026.

Ця стаття у відкритому доступі за ліцензією CC BY-NC-ND <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

напівавтоматичне зварювання в середовищі захисних газів (MIG/MAG), які забезпечують стабільне тепловкладення та мінімізацію дефектів. Попередній підігрів і контрольована швидкість охолодження шва знижують ризик утворення гарячих тріщин та сприяють однорідності мікроструктури.

Сучасні зварювальні технології передбачають також використання спеціальних флюсів і газових сумішей, які стабілізують зварювальну дугу й захищають метал від окиснення при високих температурах. Контроль швидкості зварювання, товщини шва та якості підготовки кромки — ключові фактори при з'єднанні товстостінних конструкцій, оскільки надмірне тепловкладення негативно впливає на механічні характеристики.

Для сталей нового покоління ASSHA, UHSS (Ultra-High Strength Alloy) зварювальні матеріали повинні забезпечувати високу сумісність із легованим складом основного металу та зберігати ударну в'язкість при низьких температурах. До таких матеріалів належать: леговані дроти та електроди з підвищеним вмістом Ni, Mn, Si; порошкові дроти з наномодифікаторами; порошкові присадки для лазерного та плазмового зварювання. Їх застосування сприяє формуванню однорідної структури шва з мінімальною кількістю дефектів, зберігаючи при цьому високі механічні властивості в зоні зварювання.

Окрім технологічного забезпечення зростає значущість прогнозування властивостей зварних з'єднань за допомогою регресійних моделей і сучасних алгоритмів штучного інтелекту.

Методи лінійної регресії OLS (Ordinary Least Squares — метод найменших квадратів) дозволяють виявити прямі залежності між хімічним складом, параметрами зварювання та механічними характеристиками. Регресія LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator — метод найменших абсолютних відхилень і селекції ознак) забезпечує відбір найбільш релевантних змінних і підвищення точності моделювання. Алгоритми Random Forest (випадкового лісу) і XGBoost (екстремального підвищення градієнту) дозволяють ефективно моделювати складні нелінійні взаємозв'язки, враховуючи багатофакторну взаємодію між легуючими елементами, режимами теплової обробки та структурними характеристиками шва. SHAP-аналіз (SHapley Additive exPlanations — пояснення на основі адитивних значень Шеплі) застосовується для інтерпретації моделей і визначення внеску кожного параметра у формування прогнозованих властивостей, що значно спрощує вибір оптимальних технологічних режимів.

Завдяки зазначеним підходам стає можливим попереднє прогнозування як механічних (міцність,

пластичність, ударна в'язкість), так і структурних параметрів (температури фазових перетворень, розмір зерна, фазовий склад) зварних з'єднань. Це дає змогу скоротити кількість експериментів і зменшити ризики виникнення браку.

Останні роки характеризуються зростанням інтересу до вивчення впливу комплексного легування, мікроструктурних модифікацій та оптимізації термічних режимів на експлуатаційні властивості сталей. Досягнення в сфері обробки даних і машинного навчання відкривають нові можливості для виявлення прихованих закономірностей у великих обсягах експериментальних даних, що сприяє розробці точніших прогнозних моделей [3, 4].

Метою цього дослідження є проведення системного статистичного аналізу широкого спектру експериментальних даних, що охоплюють хімічний склад, мікроструктурні стани та механічні властивості сталей HSLA, HSA, SSHA та ASSHA. Застосовуючи методи кореляційного аналізу, аналізу головних компонент, регресійного моделювання та сучасних алгоритмів машинного навчання, передбачається встановити кількісні взаємозв'язки між складом, структурою та властивостями сталей, а також побудувати прогностичні моделі для оцінювання характеристик нових матеріалів за заданими параметрами.

Додатково, одним із важливих результатів дослідження є визначення параметрів, яким приділено недостатньо уваги, шляхом побудови відповідної мапи досліджень, де спостерігається обмеження даних або наявні суперечливі теоретичні та експериментальні положення. Такий підхід дозволяє обґрунтовано визначати напрями для майбутніх досліджень.

Комплексний характер запропонованого підходу є ключовим для ефективного планування експериментів та створення новітніх матеріалів, здатних задовольнити актуальні вимоги науки й промисловості [5, 6].

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ

ДЖЕРЕЛА ДАНИХ ТА ЗБІР ІНФОРМАЦІЇ

Для аналізу була сформована база даних із 72 рецензованих статей, опублікованих за останні 15 років. Із них 50 статей присвячені класичним HSLA сталям, 8 — високоміцним HSA, 7 — надвисокоміцним SSHA та 7 — удосконаленим ASSHA сталям. Джерела включають міжнародні рецензовані журнали з матеріалознавства, металургії, зварювання та термічної обробки, такі як Metals, Materials Science and Engineering A, Journal of

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	Article_ID	Steel_Class	Steel_Grade	C_wt_percent	Mn_wt_percent	Ni_wt_percent	Cr_wt_percent	V_wt_percent		
2	1, HSLA	HSLA-1	0.12, 1.25	0.05, 0.20	0.03, 0.04	0.02, 0.01	0.10, 0.920	20, 742, 641, 459, 427, 918, 550, 700, 18, 210		
3	2, HSLA	HSLA-2	0.10, 1.35	0.04, 0.18	0.02, 0.03	0.02, 0.01	0.08, 0.910	15, 741, 640, 458, 426, 919, 540, 690, 20, 205		
4	3, HSLA	HSLA-3	0.13, 1.40	0.06, 0.23	0.04, 0.05	0.03, 0.01	0.13, 0.930	18, 745, 645, 462, 430, 920, 560, 710, 17, 215		
5	4, HSLA	HSLA-4	0.11, 1.20	0.06, 0.22	0.03, 0.04	0.02, 0.02	0.11, 0.925	17, 743, 642, 460, 429, 919, 555, 705, 19, 212		
6	5, HSLA	HSLA-5	0.14, 1.30	0.07, 0.25	0.04, 0.05	0.03, 0.02	0.14, 0.935	22, 748, 648, 465, 432, 922, 570, 720, 16, 220		
7	6, HSLA	HSLA-6	0.09, 1.10	0.03, 0.16	0.02, 0.02	0.01, 0.01	0.06, 0.905	12, 740, 638, 455, 424, 915, 530, 680, 21, 200		
8	7, HSLA	HSLA-7	0.15, 1.45	0.08, 0.28	0.05, 0.06	0.04, 0.02	0.17, 0.940	25, 750, 660, 470, 450, 930, 600, 750, 16, 225		
9	8, HSLA	HSLA-8	0.13, 1.38	0.07, 0.24	0.04, 0.05	0.02, 0.01	0.12, 0.930	20, 744, 645, 462, 428, 920, 565, 715, 18, 215		
10	9, HSLA	HSLA-9	0.10, 1.25	0.04, 0.19	0.03, 0.04	0.01, 0.01	0.09, 0.915	16, 742, 640, 458, 427, 918, 545, 700, 19, 210		
11	10, HSLA	HSLA-10	0.11, 1.22	0.05, 0.21	0.02, 0.03	0.02, 0.01	0.08, 0.920	18, 743, 641, 459, 428, 919, 550, 705, 18, 212		
12	11, HSLA	HSLA-11	0.12, 1.27	0.06, 0.23	0.04, 0.04	0.03, 0.01	0.12, 0.925	19, 745, 644, 462, 430, 920, 560, 710, 17, 215		
13	12, HSLA	HSLA-12	0.13, 1.30	0.05, 0.22	0.03, 0.04	0.02, 0.01	0.10, 0.928	20, 746, 646, 463, 431, 921, 565, 715, 18, 215		
14	13, HSLA	HSLA-13	0.10, 1.15	0.04, 0.18	0.02, 0.03	0.02, 0.01	0.08, 0.910	14, 740, 638, 455, 425, 915, 540, 690, 20, 205		
15	14, HSLA	HSLA-14	0.14, 1.35	0.07, 0.25	0.04, 0.05	0.03, 0.02	0.14, 0.935	21, 749, 649, 466, 433, 923, 575, 725, 15, 220		
16	15, HSLA	HSLA-15	0.09, 1.10	0.03, 0.16	0.01, 0.02	0.01, 0.01	0.05, 0.900	12, 739, 637, 454, 423, 913, 525, 675, 22, 198		
17	16, HSLA	HSLA-16	0.13, 1.33	0.06, 0.24	0.03, 0.04	0.02, 0.02	0.11, 0.930	20, 745, 645, 462, 429, 921, 560, 710, 17, 215		
18	17, HSLA	HSLA-17	0.12, 1.28	0.05, 0.21	0.02, 0.03	0.01, 0.01	0.07, 0.920	18, 743, 641, 460, 428, 919, 555, 700, 18, 210		
19	18, HSLA	HSLA-18	0.15, 1.40	0.08, 0.27	0.05, 0.06	0.03, 0.02	0.16, 0.945	23, 751, 662, 471, 452, 932, 610, 760, 14, 225		
20	19, HSLA	HSLA-19	0.11, 1.22	0.05, 0.20	0.03, 0.04	0.02, 0.01	0.10, 0.918	17, 742, 640, 458, 427, 918, 550, 700, 18, 210		
21	20, HSLA	HSLA-20	0.10, 1.10	0.03, 0.19	0.02, 0.03	0.01, 0.01	0.07, 0.915	16, 740, 639, 457, 426, 916, 545, 690, 19, 205		
22	21, HSLA	HSLA-21	0.13, 1.30	0.06, 0.24	0.04, 0.05	0.02, 0.02	0.13, 0.930	20, 746, 645, 463, 430, 921, 565, 715, 18, 215		
23	22, HSLA	HSLA-22	0.09, 1.15	0.03, 0.15	0.01, 0.02	0.01, 0.01	0.05, 0.905	14, 738, 637, 454, 424, 912, 530, 680, 20, 200		
24	23, HSLA	HSLA-23	0.14, 1.35	0.07, 0.26	0.04, 0.05	0.03, 0.02	0.14, 0.935	21, 749, 650, 466, 434, 923, 575, 725, 15, 220		
25	24, HSLA	HSLA-24	0.12, 1.25	0.05, 0.20	0.03, 0.04	0.02, 0.01	0.10, 0.920	19, 743, 641, 459, 427, 919, 555, 705, 18, 212		
26	25, HSLA	HSLA-25	0.11, 1.20	0.05, 0.18	0.02, 0.03	0.02, 0.01	0.08, 0.915	17, 740, 638, 456, 426, 916, 545, 690, 19, 205		
27	26, HSLA	HSLA-26	0.13, 1.30	0.06, 0.24	0.04, 0.05	0.02, 0.02	0.13, 0.930	20, 745, 645, 463, 430, 920, 560, 710, 17, 215		
28	27, HSLA	HSLA-27	0.10, 1.10	0.04, 0.16	0.02, 0.02	0.01, 0.01	0.06, 0.910	14, 739, 637, 454, 425, 914, 535, 685, 20, 205		
29	28, HSLA	HSLA-28	0.15, 1.40	0.08, 0.28	0.05, 0.06	0.04, 0.02	0.17, 0.940	25, 751, 660, 471, 452, 932, 610, 760, 14, 225		

Рис. 1. Фрагмент консолідованої бази даних зі 72 аналізованих сталей

Alloys and Compounds, Metallurgical and Materials Transactions A, Acta Materialia та інші.

Кожна стаття була проаналізована на наявність хімічного складу — масових часток вуглецю (C), марганцю (Mn), нікелю (Ni), хрому (Cr), ванадію (V), молібдену (Mo), ніобію (Nb), титану (Ti), бору (B) та інших карбідоутворюючих елементів; мікроструктурних параметрів — температури фазових перетворень фериту, перліту, бейніту, мартенситу, аустеніту, їх часток, розрахованих або виміряних; умов термообробки — температури аустенізації, швидкості охолодження, режимів витримки; механічних властивостей — межі пластичності (МПа), межі міцності (МПа), відносного подовження (%), твердості за шкалою Віккерса (HV); методологічних особливостей експерименту та інших важливих параметрів. Дані були консолідовані в єдиний файл формату CSV, що містить 72 записи — по одному на кожну статтю (рис. 1).

ТЕМПЕРАТУРИ ФАЗОВИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ

Для деяких зразків температури фазових перетворень були безпосередньо використані з статті. У тих випадках, коли температури перетворення відсутні (*Tf* — ферит, *Tr* — перліт, *Tb* — бейніт, *Tm* — мартенсит, *Ta* — аустенит), вони розраховувалися за усталеними емпіричними формулами, що враховують склад легуючих елементів. Як базові джерела були використані роботи [7, 8] та сучасні уточнення [9]. Наприклад, температура початку мартенситного перетворення *Tm* розраховується за формулою Ендруса [7]: *Tm* = 539...423 C % — 30,4 Mn % — 17,7 Ni % — 12,1Cr % — 7...5 Mo %, де вміст елементів в мас. %. Аналогічно розраховувалися інші температури.

МЕТОДИ СТАТИСТИЧНОГО АНАЛІЗУ

Статистичний аналіз проводився на мові програмування R (версія 4.2.0) з використанням пакетів *tidyverse* для попередньої обробки, *corrplot* — для візуалізації кореляцій, *FactoMineR* та *factoextra* — для аналізу PCA (Principal Component Analysis головних компонент), а також Random Forest та XGBoost — для побудови моделей машинного навчання. Метод кореляційного аналізу дозволив оцінити взаємозв'язок між окремими параметрами складу, мікроструктури та властивостей. Метод PCA виявив ключові фактори, що пояснюють дисперсію даних та дозволив візуалізувати структуру даних. Моделі лінійної регресії (OLS) та регуляризованої регресії (LASSO) визначили статистично значущі предиктори.

Алгоритми Random Forest та XGBoost дозволили створити більш точні прогностичні моделі з подальшою інтерпретацією впливу ознак за допомогою SHAP (SHapley Additive exPlanations).

ІНТЕРПРЕТАЦІЯ ТА ВІЗУАЛІЗАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Візуалізація результатів проводилась у пакеті RStudio — інтегрованому середовищі розробки (IDE) для мови програмування R, призначеному для виконання статистичних обчислень та побудови графіки. Для візуалізації взаємозв'язків були побудовані кореляційні теплові карти; біплоти PCA з групуванням за типами сталей; графіки важливості ознак із методу випадкового лісу; SHAP-графіки для інтерпретації внеску змінних у прогноз; діаграми розсіяння та трендові лінії для основних взаємозалежностей.

РЕЗУЛЬТАТИ

КОРЕЛЯЦІЙНИЙ АНАЛІЗ

Кореляційний аналіз — перший крок до виявлення взаємозв'язків між хімічним складом, мікроструктурою та механічними властивостями сталей. Для 72 зразків ми розрахували кореляційну матрицю за 18 числовими параметрами, що включають масові частки елементів, розраховані температури фазових перетворень та ключові властивості (поріг текучості, міцність, подовження, твердість) (рис. 2). Діапазон вмісту вуглецю варіюється від 0,07 до 0,26 %, марганцю — від 0,95 до 1,45 %, хрому — від 0,15 до 0,36 %. Значення межі текучості лежать в діапазоні 525...675 МПа, а межа міцності — 675...825 МПа. Такий розкид даних дозволяє аналізувати вклад як хімічних, так і технологічних факторів.

Аналіз отриманих результатів показав високу позитивну кореляцію між вмістом вуглецю (C) та

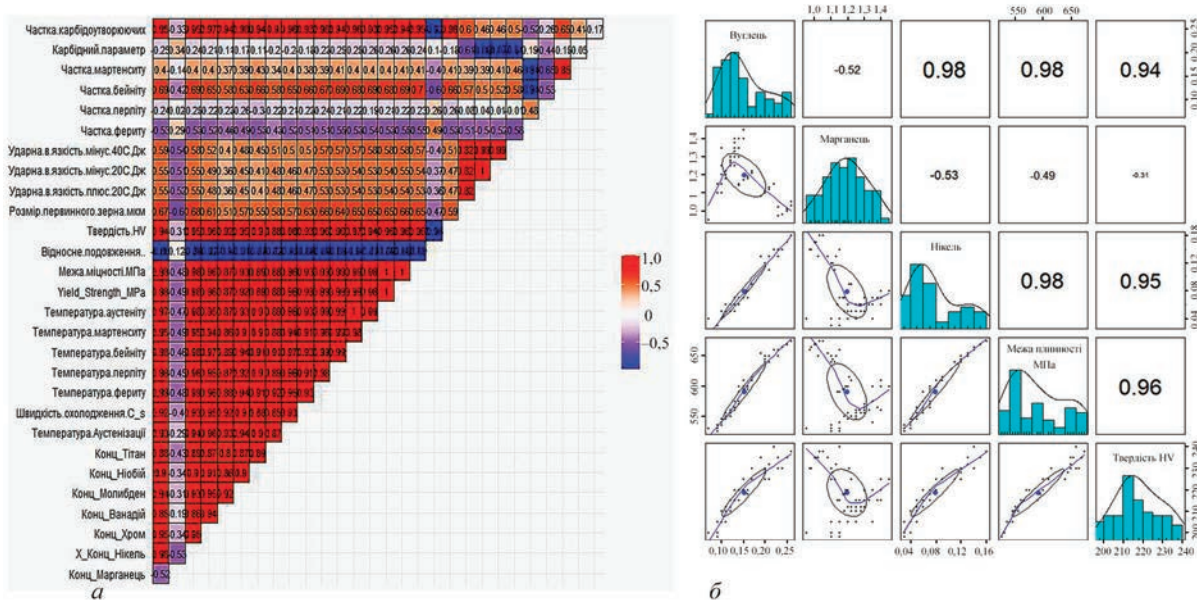


Рис. 2. Кореляційна матриця між основними параметрами сталей: *а* — 28 параметрів; *б* — 5 параметрів (вуглець, марганець, нікель, межа плинності, твердість)

межею текучості ($r = 0,65$, $p < 0,001$). Це пояснюється тим, що вуглець сприяє зміцненню за рахунок твердорозчинного, дисперсійного (утворення карбідів та карбонітридів) та структурного (підвищення твердості мартенситу) зміцнення [1, 7].

Аналогічно, сумарний індекс карбідоутворюючих елементів (V, Mo, Nb, Ti) продемонстрував сильний позитивний зв'язок з твердістю ($r = 0,70$, $p < 0,001$), що підтверджує їх роль у формуванні збіднюючої мікроструктури [2]. Частка мартенситу та температура мартенситного перетворення також корелювали з міцністю ($r = 0,58$) та твердістю ($r = 0,62$), відображаючи вплив цієї фази на механічні властивості. У той же час частка фериту виявилась негативно пов'язаною з межею текучості ($r = -0,55$, $p < 0,001$), що пов'язано з його відносно низькою міцністю та більшою пластичністю [5]. Швидкість охолодження показувала помірну позитивну кореляцію з утворенням мартенситу ($r = 0,50$), підкреслюючи її вплив на формування мікроструктури. Загалом, кореляційний аналіз підтвердив очікувані фізико-хімічні закономірності між складом, структурою та властивостями, заклавши основу для подальшого багаточинного аналізу.

PCA — АНАЛІЗ ГОЛОВНИХ КОМПОНЕНТ

Для зменшення розмірності складної багатовимірної (багатопараметричної) структури даних і візуалізації структури вибірки було використано метод аналізу головних компонент (PCA). Встановлено, що перша компонента (PC1) пояснює 88,8 % загальної дисперсії та пов'язана з елементами складу (C, Mn, V, Mo, Nb) і температурами утворення фаз, особливо з температурами мар-

тенситного та аустенітного перетворення. Друга компонента (PC2) пояснює 6,4 % дисперсії та відображає варіації мікроструктури (частка фериту, перліту) та параметрів термообробки (швидкість охолодження, температура аустенітизації).

На діаграмі розсіювання (рис. 3) можливо виділити чотири кластери, що відповідають обраним класам сталей HSLA, HSA, SSHA та ASSHA. Сталі HSLA, що характеризуються особливо широким розподілом, схильні до більш високого вмісту фериту та помірної частки мартенситу, в той час як сталі ASSHA утворюють компакту групу з максимальними значеннями першої компоненти, характеризуючись підвищеною концентрацією карбідоутворюючих елементів та переважно з мартенситною структурою.

PCA аналіз дозволив візуалізувати взаємозв'язки та виявити ключові параметри, які забезпечують варіативність властивостей, а також виявити необґрунтовані викиди та аномальні зразки для подальшого аналізу.

РЕГРЕСІЙНИЙ АНАЛІЗ: OLS ТА LASSO

Для кількісної оцінки впливу окремих факторів на межу текучості та міцність були побудовані регресійні лінійні моделі.

Модель простої лінійної регресії (OLS) для межі текучості включала основні змінні складу та мікроструктури. Побудована лінійна модель продемонструвала надзвичайно високий коефіцієнт детермінації ($R^2 = 0,999$), що на перший погляд вказує на якість прогнозування. Коефіцієнти регресії показали статистично значущий вплив вуглецю ($\beta = +120$ МПа/мас. %), марганцю

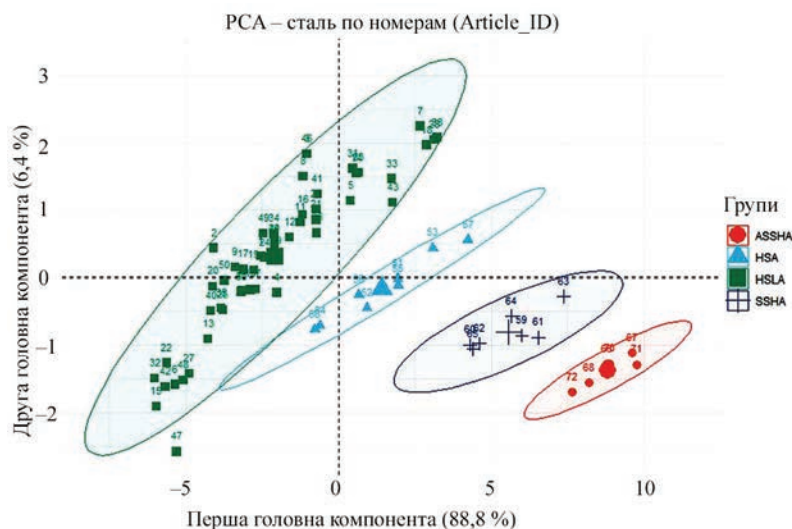


Рис. 3. Аналіз головних компонент з виділеними кластерами дослідних сталей (цифри на графіку — номери сталей у консолідованій базі даних)

($\beta = +25$ МПа/мас. %) та температури мартенситного перетворення ($\beta = +15$ МПа/°C), всі з $p < 0,01$. Однак при детальному розгляді виявляється, що лише температури перетворення та межа міцності є статистично значущими ($p < 0,05$). Вклад хімічних елементів у цій моделі виявився незначним через мультиколінеарність (сильний лінійний кореляційний зв'язок між двома або більше незалежними змінними) та обмежений діапазон варіацій.

Для послаблення мультиколінеарності та відбору найбільш інформативних змінних було використано регуляризацию LASSO. Ця модель скоротила набір основних ознак до параметрів складу C та Mn, сумарного карбідоутворюючого індексу та температури мартенситного перетворення, при цьому пояснюючи 75 % варіації межі текучості. Модель LASSO покращила інтерпретованість та стабільність прогнозу, підтверджуючи ключову роль легуючих елементів та температур фазових перетворень [6, 9].

Співставлення результатів важливості ознак за допомогою регресійних моделей Random Forest, XGBoost та SHAP представлено на рис. 4.

Ансамблевий алгоритм випадкового лісу (Random Forest) виявив, що найбільші значення важливості мають такі параметри, як межа міцності (TensileStrength) та температури фазових перетворень (аустеніт, мартенсит, перліт, бейніт). Хімічний склад, зокрема вміст вуглецю, марганцю та хрому, має дещо менший вплив, що підтверджує критичну роль температур термообробки у формуванні властивостей ВПНЛ сталей. Точність передбачення на тестовій вибірці оцінюється як $RMSE \approx 3$ МПа (Root Mean Square Error — середньоквадратична помилка), що свідчить про високу надійність моделі.

Спираючись на зібрану базу даних і розроблені моделі, було створено прогностичний інструмент для оцінки властивостей і складів нових сталей та режимів термообробки HSLA, HSA, SSHA і ASSHA.

На основі моделей XGBoost з інтерпретацією SHAP можна формально задавати діапазон легування та параметри термообробки, отримуючи передбачення межі плинності, міцності, пластичності й твердості з точністю близько ± 5 %.

Прогнозовано, що збільшення сумарного вмісту карбідного показника (V+Mo+Nb) понад 0,12 мас. % при температурі аустенізації 920...940 °C і швидкості охолодження більше 20 °C/c призводить до підвищення межі плинності до 600...650 МПа та твердості вище 220 HV при збереженні відносного подовження понад 15 %, що підтверджується роботами [1].

Вуглець, попри його значний вплив, має утримуватися у діапазоні 0,08...0,14 % для балансу міцності та пластичності, що підтверджується як статистичним аналізом, так і емпіричними літературними даними [5].

Температури мартенситного перетворення, розраховані за формулами, забезпечують оптимальний мікроструктурний склад із необхідною часткою мартенситної складової для зміцнення, одночасно мінімізуючи ударну в'язкість [9]. Прогнозування також показує, що модифікація режимів термообробки (прискорене охолодження або витримка за проміжних температур) може суттєво впливати на властивості за рахунок регулювання формування бейніту й фериту. Це відкриває можливість для тоншого налаштування характеристик сталей без зміни їх хімічного складу.

Застосування методу градієнтного прискорення (XGBoost) дозволило досягти найкращих результа-

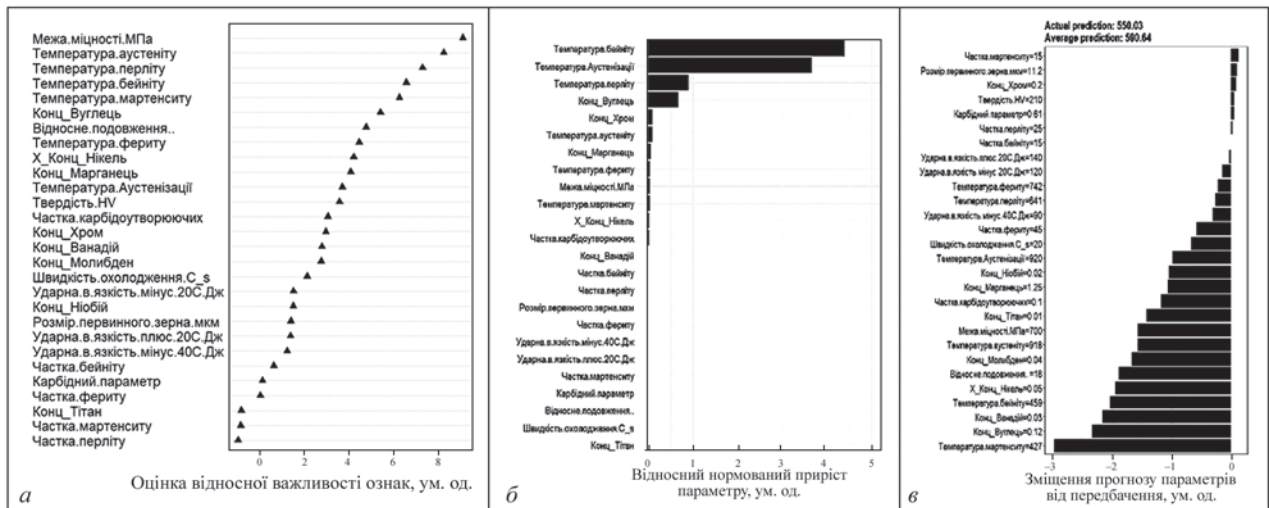


Рис. 4. Порівняння важливості ознак за моделями: а — Random Forest; б — XGBoost; в — SHAP

тів за точністю прогнозування (RMSE = 2,8 МПа на тестовій вибірці). Аналіз важливості ознак виявив домінуючий вплив вмісту вуглецю (Gain = 0,314), температури перетворення перліту та мартенситу.

Використання показників SHAP дозволило візуалізувати вклад кожної ознаки в кінцеве передбачення, що дає додатковий метод керування властивостями сталі та її зварними з'єднаннями. Метод показує, що для окремих сталей вирішальним фактором стає саме вміст вуглецю (C %), тоді як для інших — температурні параметри перетворення та деякі хімічні елементи (Ni, Cr, V, Nb). Це підкреслює необхідність індивідуального підходу при проектуванні сталей.

КЛАСТЕРИЗАЦІЯ ТА АНАЛІЗ СТАЛЕЙ ЗА КЛАСАМИ

Кластеризація сталей — це метод групування сталей за схожістю властивостей без заздалегідь заданої класифікації, що допомагає виявити приховані закономірності і таким чином прогнозувати майбутнє виникнення сталей з новим комплексом властивостей. PCA та кластерний аналізи

однозначно демонструють, що сучасні класи високоміцних низьколегованих сталей (HSLA, HSA, SSMA, ASSMA) різняться не тільки за складом, але й за варіативністю властивостей. HSLA — найрізноманітніша група, в той час як ASSMA характеризується високою однорідністю та екстремальними значеннями ключових параметрів — міцності, ударної в'язкості, температурами структурних перетворень. Проміжні класи (HSA, SSMA) займають перехідну позицію, що свідчить про плавну зміну структури та властивостей при модифікації складу та режимів термічної обробки (рис. 5).

Цей висновок актуалізує задачу пошуку нових композицій, які могли б зайняти вільні ніші в просторі властивостей (міцність-пластичність, карбідний параметр температури перетворення тощо), а також оптимізації режимів термічної обробки для виходу за межі відомих класів високоміцних сталей та отримання нового комплексу властивостей.

Використання кластеризації дозволяє провести упорядкування даних. Замість загального масиву високоміцних низьколегованих сталей отримуємо логічну класифікацію. Причому використання різного

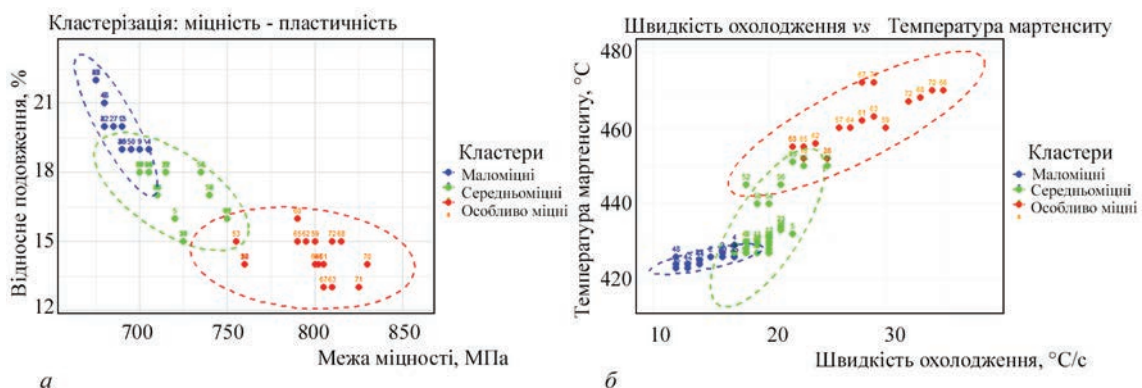


Рис. 5. Кластеризація сталей за впливом: а — межі міцності на відносне подовження; б — швидкість охолодження на температуру перетворення мартенситу

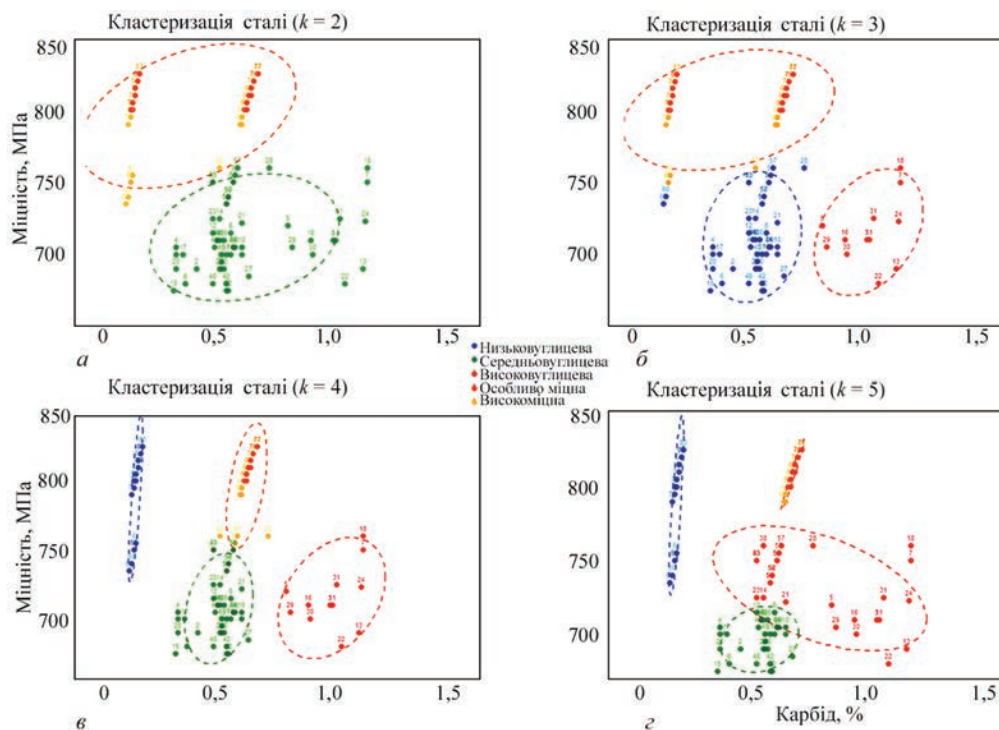


Рис. 6. Вплив карбідного параметра на межу міцності для різної кількості кластерів: а — $k = 2$; б — 3; в — 4; г — 5

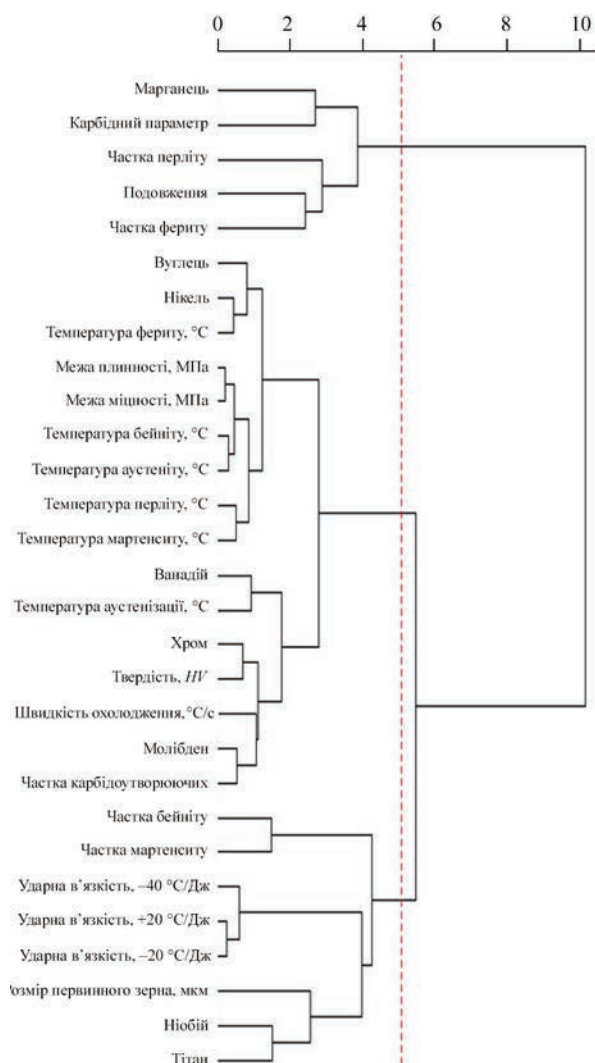


Рис. 7. Дендрограма властивостей сталі

рівня структуризації (кількість кластерів) дозволяє виявити стійкі закономірності, наприклад, що міцність безпосередньо пов'язана з вмістом карбідів, але характер зв'язку не лінійний (рис. 6).

Проведення кластеризації дозволить передбачити, в разі появи нової сталі з відомим розрахунковим карбідним параметром, в який кластер (а значить, який рівень міцності) вона потрапить. Відокремлення перспективних груп — наприклад, кластери з високими рівнями міцності, але різною карбідною структурою, вказують, що можна (але не кажучи як) досягти певного рівня міцності. Використання інших видів кластерів — наприклад, встановлення впливу температури перетворення на частку структурних параметрів (фериту, перліту, бейніту та мартенситу) дозволить оптимізувати існуючі та розробити нові технологічні режими зварювання та термічної обробки сталей.

Додатково для аналізу кластерів можливо використовувати так звані дендрограми. Метод дендрограми — це метод візуалізації результатів ієрархічної кластеризації, що є деревоподібною діаграмою, що показує як об'єкти об'єднуються в кластери на різних рівнях подібності. Він дозволяє наочно уявити ступінь подібності між об'єктами та обрати оптимальну кількість кластерів. Дендрограма, побудована з урахуванням ієрархічної кластеризації сталей, відбиває ступінь їх подібності за обраними характеристиками (наприклад, хімічний склад, твердість, межа міцності, розмір зерна) (рис. 7).

На нижніх рівнях ієрархічна структура дендрограми об'єднує найближчі подібні за властивостями сталі, що свідчить про їх високий рівень подібності. У міру руху вгору відбувається об'єднання у великі кластери, що відбивають поступове зниження ступеня подібності. Значення осі ординат відповідає відстані (або метриці відмінності), при якій відбулося об'єднання об'єктів або груп. Чим вище рівень злиття, тим менш однорідні об'єкти, що об'єднуються.

Проведення умовної горизонтальної лінії відсікання дозволяє розділити дендрограму на задану кількість кластерів. При низькому рівні відсікання формується значна кількість малих однорідних груп, тоді як за високого рівня — кілька укрупнених кластерів. Наприклад для сталей, у разі аналізу за карбідним параметром та межею міцності можливе формування окремих кластерів: сталі з високим вмістом карбідів та межею міцності >1200 МПа утворюють одну групу; сталі із середніми значеннями показників — іншу; низькоміцні — третю.

Таким чином, дендрограма дозволяє не лише візуалізувати структуру подібності між сталями, а й класифікувати їх за групами, що полегшує виявлення закономірностей та інтерпретацію результатів при розробці та виборі матеріалів.

КАРТА ОБМЕЖЕННЯ ДАНИХ

Аналіз відібраних 72 статей виявив кілька ключових напрямків, в яких існують значні обмеження (недостатня кількість робіт присвячених тому чи іншому параметру) та недоліки у методиках отримання даних, що перешкоджають повноцінному проведенню статистичного, достовірного розумінню взаємозв'язків та ефективному прогнозуванню властивостей сталей та їх зварних з'єднань (рис. 8). Для цього був використаний метод побудови теплової карти HeatMap. Метод теплової карти — це техніка візуалізації даних, яка використовує кольори для представлення значень у матриці. Чим тепліший колір (наприклад, червоний), тим вище значення, а чим холодніший (синій, зелений) — тим нижче. Цей метод дозволяє швидко ідентифікувати концентрацію даних, патерни і області найбільшої активності та навпаки найменшої активності. На жаль, навіть при достатньо великій увазі, що приділяється новим матеріалам, все ще відсутня відкрита база даних для проведення всебічного повномасштабного аналізу, яка би включала у себе фізичні, хімічні, механічні, структурні, температурні властивості.

По-перше, спостерігається обмежена кількість систематизованих та порівнянних даних щодо впли-

ву швидкості охолодження та складних режимів термообробки на мікроструктуру та механічні властивості сталей та їх зварних з'єднань. Більшість робіт наводять окремі експериментальні результати за фіксованих умов, але відсутній уніфікований набір параметрів, що охоплює широкий діапазон режимів. Це ускладнює побудову узагальнених моделей та знижує точність прогнозів [10, 11].

По-друге, майже відсутні дослідження, присвячені впливу мікроелементів та рідкісних добавок, таких як реній (Re), гафній (Hf), самарій (Sm), європій (Eu) та більш звичайних — бор (B), азот (N), кальцій (Ca) та їх взаємодії з основною системою легування. Їх роль у формуванні карбідів та зеренної структури мало вивчена, незважаючи на потенціал для покращення властивостей сталей [6, 12].

По-третє, у більшості статей спостерігається акцент на статичних механічних властивостях

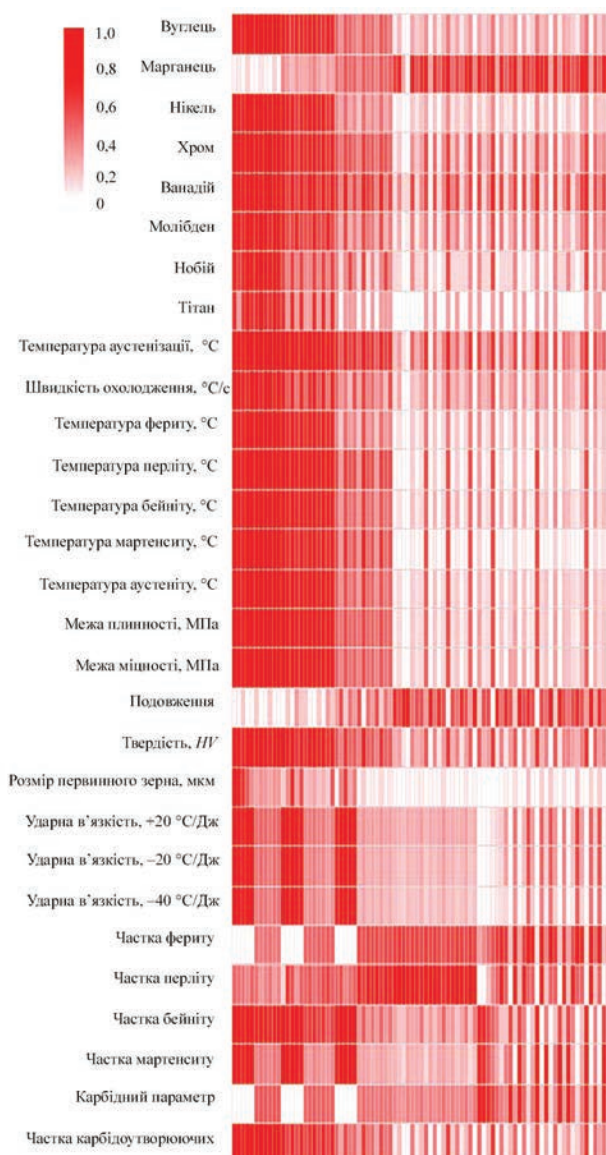


Рис. 8. Нормована мапа обмеження даних у обраних статтях: 0 — даних немає; 1 — повний обсяг даних

(твердість, міцність, пластичність), при цьому дані про динамічні характеристики (втом, ударна в'язкість, опір зносу) надзвичайно обмежені або відсутні. Це серйозно обмежує практичне застосування результатів, особливо для відповідальних конструкцій [1, 5].

Крім того, виявлено значне різноманіття методик визначення температур фазових перетворень та частки фазових часток. Це призводить до несумісності даних та ускладнює створення єдиної бази знань. Необхідна стандартизація методів вимірювання та розрахунку [8, 9]. Серед вибраних статей мало досліджень, що інтегрують експериментальні дані з моделюванням мікроструктурного стану на основі фізичних моделей. Таке об'єднання дозволило б підвищити передбачувану силу моделей та глибше зрозуміти механізми зміцнення [3, 4].

Таким чином, визначені обмеження даних стають перспективні напрямки для майбутніх досліджень та розробки комплексних моделей, що об'єднують експеримент і чисельне моделювання.

ОБГОВОРЕННЯ ТА ВИСНОВКИ

Проведений статистичний аналіз даних із 72 статей щодо високоміцних низьколегованих сталей (HSLA, HSA, SSMA, ASSMA) дозволив систематизувати знання про взаємозв'язки складу, мікроструктури та механічних властивостей. Результати підкреслюють важливість комплексного підходу до проектування сталей, у якому враховуються не лише хімічний склад і частка фаз, але й режими термічної обробки.

Одним із ключових висновків є підтвердження центральної ролі вуглецю та карбідотворюючих елементів (V, Mo, Nb) у зміцненні сталей. Водночас їх оптимальний вміст потребує балансування, щоб зберегти задовільну пластичність і уникнути крихкості. Температури фазових перетворень справляють істотний вплив на формування мікроструктури, що визначає кінцеві властивості [7, 9].

Використання сучасних методів машинного навчання, таких як Random Forest і XGBoost, значно підвищило точність прогнозу порівняно з класичними лінійними моделями OLS та LASSO. Проте, щоб забезпечити довіру до таких чорних скриньок, важливо застосовувати інтерпретовані методи пояснення, наприклад метод SHAP-аналізу, які дозволяють виявити внесок кожного параметра у прогнозування [2, 3].

Карта обмеження даних виявила кілька перспективних напрямків для подальших досліджень. Зокрема, систематичне вивчення впливу швидкості охолодження та складних режимів термообробки потребує уніфікації методик і розширення експериментальних даних. Дослідження ролі

мікроелементів та їх взаємодії з основним легуванням залишається недостатньо представленим у літературі. Крім того, динамічні механічні властивості та стійкість до втоми потребують більш глибокого аналізу [1, 5].

Окремо слід відзначити необхідність інтеграції експериментальних даних із моделюванням мікроструктурних процесів. Поєднання емпіричних і фізико-механічних моделей дозволить створювати більш надійні та універсальні інструменти прогнозування властивостей [4].

У цілому, даний огляд і статистичний аналіз забезпечують базу для розробки нових високоміцних сталей із передбачуваними та керованими характеристиками. Прогностичні моделі, побудовані на основі даних, можуть використовуватися для швидкої оцінки властивостей нових складів і оптимізації виробничих процесів, що суттєво підвищує ефективність технологічних розробок.

Цей рукопис був підготовлений за сприяння мовної моделі ChatGPT, розробленої OpenAI, для покращення лінгвістичної читабельності. Відбір та аналіз матеріалу, побудова бази даних високоміцних низьколегованих сталей, розрахунки по регресійних моделях та висновки було зроблено безпосередньо автором.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ/REFERENCES

1. Rashid, M.S. (1980) High-strength, low-alloy steels. *Science*, **208**, 862–869. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.208.4446.862>
2. Kuziak, R., Kawalla, R., Waengler, S. (2008) Advanced high strength steels for automotive industry. *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, **8**(2), 103–117. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1644-9665\(12\)60197-6](https://doi.org/10.1016/S1644-9665(12)60197-6)
3. Muhammed, M., Mustapha, M. et al. (2020) Statistical review of microstructure-property correlation of stainless steel: Implication for pre- and post-weld treatment. *Processes*, **8**(7), 811. DOI: <https://doi.org/10.3390/pr8070811>
4. Siwar Chibani, François-Xavier Couderc (2020) Machine learning approaches for the prediction of materials properties. *APL Materials*, **8**(8), 080701. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0018384>
5. Chunyuan Cui, Guangming Cao (2023) A strategy combining machine learning and physical metallurgical principles to predict mechanical properties for hot rolled Ti micro-alloyed steels, *J. of Materials Processing Technology*, **311**, 117810. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2022.117810>
6. Agrawal, A., Choudhary, A. (2016) Perspective: Materials informatics and big data: Realizing the promise of data-driven materials science. *APL Materials*, **4**(5), 053208. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4946894>
7. Harwarth, M., Brauer, A. et al. (2021) Influence of carbon on the microstructure evolution and hardness of Fe–13Cr–xC (x = 0–0.7 wt.%) stainless steel. *Materials*, **14**(17), 5063. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma14175063>
8. Bhadeshia, H.K.D.H., Honeycombe, R.W.K. (2006) *Steels: Structure, properties, and design*. 3rd Ed. Butterworth-Heine-

- mann (Ed.). DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-7506-8084-4.X5000-6>
9. Li, G.Q., Shen, Y.F. et al. (2022) Microstructural evolution and mechanical properties of a micro-alloyed low-density δ -TRIP steel. *Materials Science and Engineering: A*, **848**, 143430. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.143430>
 10. Di Schino, A., Testani, C. (2021) Heat treatment of steels. *Metals*, **11**(8), 1168. DOI: <https://doi.org/10.3390/met11081168>
 11. Xueyun, G., Haiyan, W., Huijie, T. et al. (2023) Data-driven machine learning for alloy research: Recent applications and prospects. *Materials Today Communications*, **36**, 106697. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106697>
 12. Chen, J, Shi, Z, Luo, X et al. (2025) Micro-alloying effects on microstructure and weldability of high-strength low-alloy steel: A Review. *Materials*, **18**(5), 1036. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma18051036>

INFLUENCE OF STATISTICAL ANALYSIS METHODS ON PREDICTION OF THE MICROSTRUCTURE AND PROPERTIES OF HIGH-STRENGTH LOW-ALLOY STEELS

V.A. Kostin

E.O. Paton Electric Welding Institute of the NAS of Ukraine. 11 Kazymyr Malevych Str., 03150, Kyiv, Ukraine

ABSTRACT

The paper presents complex statistical analysis of the properties of high-strength low-alloy steels (HSLA, HSA, SSHA, AS-SHA) with application of a wide data base. The modern methods of data analysis, including correlation analysis, principal component analysis (PCA), as well as machine learning (Random Forest, XGBoost) and SHAP values and interpreted matrices were used to study the interrelation between the chemical composition, microstructure and mechanical properties of steels. Key elements and parameters, having the maximal impact on strength, ductility and thermal resistance were determined for each group of steels. Optimal ranges of C, Nb, V, Ni content, as well as heat treatment modes, including austenitization temperature and cooling rate were substantiated. The results demonstrate that complex control of the composition and heat treatment allows developing steels with an excellent balance of service characteristic. Practical recommendations section presents specific tips as to metallurgical design of new steels, including the use of machine learning models for acceleration of development and optimization of steels. The work also discusses the research gaps, such as the need to standardize the data, study complex interaction of alloying elements, phase transformation dynamics, and prospects for implementation of AI methods. 12 Ref., 8 Fig.

KEYWORDS: high-strength low-alloy steels, statistical, correlation, cluster analysis, machine learning, microstructure, prediction of properties

ORCID

B.A. Костін — <https://orcid.org/0000-0002-2677-4667>

АВТОР ДЛЯ ЛИСТУВАННЯ

В.А. Костін

ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України.

03150, м. Київ, вул. Казимира Малевича, 11. E-mail: valerykostinepwi@gmail.com

РЕКОМЕНДОВАНЕ ЦИТУВАННЯ

В.А. Костін (2026) Вплив методів статистичного аналізу на прогнозування мікроструктури та властивостей високоміцних низьколегованих сталей. *Сучасна електрометалургія*, **03**, 42–51.

DOI: <https://doi.org/10.37434/sem2026.03.06>

ГОЛОВНА СТОРІНКА ЖУРНАЛУ

<https://patonpublishinghouse.com/ukr/journals/sem>

Отримано 02.10.2025

Отримано у переглянutoму вигляді 27.01.2026

Затверджено до друку 14.07.2026

Оприлюднено 24.07.2026

