4 Optimale weegschema's

Sandjai Bhulai, Thomas Breuer, Eric Cator en Fieke Dekkers

Inleiding

De kilogram is de laatste fysische grootheid die nog gedefinieerd is in termen van een tastbaar object: het is de massa van een platinum-iridium cilinder, vervaardigd in 1889, die bij het 'Bureau des Poids et des Mesures' in Frankrijk bewaard wordt. Om precies te zijn is de kilogram gedefinieerd als de massa van dit object net nadat het gewassen is. Platinum-iridium adsorbeert koolhydraten uit de atmosfeer, waardoor de cilinder regelmatig gewassen moet worden om het gewicht te verwijderen dat erop neergeslagen is.

In Nederland is het Nederlands Meetinstituut (NMi) in letterlijke zin verantwoordelijk voor de kilogram: de Nederlandse standaard kilogram, de platinum-iridium cilinder nummer 53, wordt op NMi terrein onder zorgvuldig gereguleerde omstandigheden bewaard. De cilinder reist af en toe naar Parijs om daar vergeleken te worden met de internationale standaard. Uiteraard draagt het NMi zorg voor meer dan alleen de veilige opslag van de kilogram: de afdeling 'massameting' is, onder meer, ook verantwoordelijk voor zeer nauwgezette kalibratie van gewichten. Deze gewichten worden gebruikt om de massa's van gewichten van lagere standaarden te bepalen, die bijvoorbeeld door supermarkten gebruikt worden om hun weegschalen te kalibreren, of door doping laboratoria, waar zeer kleine massa's met grote nauwkeurigheid vastgesteld moeten worden.

Voor de kalibratie van gewichten gebruikt het NMi gewichten van roestvrij staal, waarvan de massa's met zeer grote nauwkeurigheid bepaald moeten worden. Om resultaten met voldoende precisie te verkrijgen, moeten de metingen gecorrigeerd worden voor effecten als de opwaartse luchtdruk en de verschillen in de positie van het massamiddelpunt voor verschillende gewichten!

Het probleem

De Nederlandse kilogram wordt gebruikt als startpunt in het bepalen van de massa's van de gewichten van de hoogste kwaliteit roestvrij staal: eerst wordt de massa van een roestvrijstalen kilogram bepaald door directe vergelijking met de nationale standaard. In de tweede stap wordt de twee roestvrij stalen kilogram gebruikt en niet de nationale platinum-iridium kilogram, opdat externe invloeden minimaal effect hebben op de nationale standaard. De roestvrij stalen kilogram wordt vervolgens gebruikt om een roestvrij stalen set van gewichten te kalibreren bestaande uit een gewicht met nominale massa van 500 gram, twee van 200 gram en twee van 100 gram, zodat de honderdvouden van 1000 gram naar 100 gram gedekt zijn. Het verschil tussen de nominale massa en de echte massa van de gewichten is extreem klein. De gewichten van deze set worden vervolgens gebruikt om massa's van andere sets met andere ranges te bepalen.

Om de massa van een individueel gewicht te bepalen, kunnen we het vergelijken met het standaard gewicht met gelijke nominale massa waarvan de feitelijke massa bekend is met voldoende nauwkeurigheid – tenzij we natuurlijk de massa op het hoogste niveau van precisie willen bepalen. Massametrologie instituten gebruiken zogenaamde *weegschema's* om dit probleem op te lossen. Een weegschema voor de set van gewichten van 1000g naar 100g van het NMi bestaat uit paren van combinaties van gewichten uit de collectie van de 6 gewichten. Een schema kan bijvoorbeeld een vergelijking van een van de 200g gewichten met de twee 100g gewichten in zich hebben. Voor elk paar in het schema worden de verschillen in massa tussen de twee paren bepaald door middel van de STS procedure, die hieronder beschreven zal worden. Om voldoende precisie te garanderen worden de paren in een weegschema zo gekozen dat ze gelijke nominale massa hebben.

Het is in theorie mogelijk om de vijf onbekende massa's te bepalen door vijf geschikte metingen van massaverschillen uit te voeren. In de praktijk worden er echter meetfouten gemaakt en moeten er meer metingen – niet noodzakelijk allemaal met verschillende combinaties van gewichten – verricht worden om tot nauwkeurigere schattingen van de ware massa's te komen. De schattingen van de massa's van de gewichten en de onzekerheid in deze massa's kunnen verkregen worden uit een overbepaald stelsel met behulp van de kleinste kwadraten analyse.

Gedurende de 'Studiegroep Wiskunde met de Industrie' die in februari 2005 aan de Vrije Universiteit gehouden werd, werd de volgende vraag door het NMi gesteld: *Wat is een optimaal weegschema voor de set van gewichten van het NMi, d.w.z. een weegschema dat de onzekerheid in de geschatte massa's minimaliseert onder de voorwaarde dat het aantal metingen kleiner is dan een gegeven getal.*

De STS procedure

Zoals eerder vermeld is, wordt voor elk paar in een weegschema het verschil in massa bepaald door middel van de STS procedure. Neem, om de STS procedure te illustreren, twee sets van gewichten met ongeveer dezelfde massa. De balans om de massaverschillen te meten is een balans met enkelvoudige arm, waarmee het massaverschil tussen twee sets gewichten als volgt bepaald wordt. De eerste set, die we de standaard set (S) noemen, wordt geplaatst op de balans, die daarna op 0 wordt gesteld. De set S wordt verwijderd, en daarna nog eens op de balans geplaatst, waarna de eerste meting, x_0, afgelezen wordt.

Helaas is x_0 in het algemeen niet gelijk aan nul; in de praktijk wordt er een drift geobserveerd tussen opeenvolgende metingen, ook worden er meetfouten gemaakt. Vervolgens wordt de set S verwijderd en de tweede set, die we de test set (T) noemen, wordt op de balans geplaatst, waarna de tweede meting, x_1, afgelezen wordt. De metingen worden nu door S en T te alterneren voorgezet; dit verklaart de naam *STS procedure*. Als de drift niet al te wild fluctueert tussen opeenvolgende metingen, dan kan dit geëlimineerd worden door gebruik te maken van de STS procedure.

De metingen worden zo veel mogelijk herhaald om tot betrouwbare resultaten te komen. In de huidige opstelling die het NMi nu gebruikt, worden de gewichten handmatig op elkaar gestapeld, wat een tijdrovende procedure is. In de praktijk is het daarom zelden mogelijk om meer dan 20 metingen te verrichten zonder onderbrekingen.

Het modelleren van STS metingen

Stel dat we $k+1$ STS metingen verrichten met de sets S, met massa m_S, en T, met massa m_T. Laat x_i de i-de meting zijn, voor $0 \leq i \leq k$. We veronderstellen dat

$$x_i = 1_{\{i \text{ oneven}\}}(m_T - m_S) + D(i) + V_i,$$

waar V_i een meetfout is, die we proportioneel aan de totale massa op de balans veronderstellen. Om precies te zijn nemen we aan dat

$$V_i \sim N(0, \alpha^2 m_S^2), \tag{4.1}$$

waarbij $\alpha \in \mathbb{R}$ een onbekende constante is. De term $D(i)$ beschrijft de drift van de balans. We gaan er vanuit dat

$$\frac{D(i+1) + D(i-1)}{2} - D(i) \approx 0, \tag{4.2}$$

voor alle $1 \leq i \leq k-1$, wat consistent is met aannamen die doorgaans door het NMi gemaakt worden. Aan deze eis wordt natuurlijk voldaan wanneer D lineair is.

Definieer voor $1 \leq i \leq k-1$

$$\Delta\mu_i = \frac{(-1)^{i+1}}{m_S}\left(x_i - \frac{x_{i+1} + x_{i-1}}{2}\right) \approx \frac{m_T - m_S}{m_S} + E_i, \tag{4.3}$$

waarbij

$$E_i = \frac{1}{m_S}\left(V_i - \frac{V_{i+1} + V_{i-1}}{2}\right) \sim N(0, \alpha^2),$$

onafhankelijk van m_S. Observeer dat, gebruikmakend van (4.2), de drift geëlimineerd wordt.

In de procedure die nu door het NMi gebruikt wordt, wordt het gemiddelde van de $\Delta\mu_i$ gebruikt als een benadering voor $\frac{m_T - m_S}{m_S}$. We stellen een procedure voor die deze tussenliggende stap overbodig maakt.

Optimale weegschema's

Na het modelleren van de STS metingen kunnen de optimale weegschema's voor de set van gewichten van het NMi bepaald worden. De balans in de STS procedure kan gebruikt worden om nauwkeurig hele kleine verschillen in massa's te meten, maar kan niet met voldoende precisie voor grote massaverschillen gebruikt worden. Dit impliceert dat de test en de standaard massa's in een STS meting dezelfde nominale massa moeten hebben, wat een sterkte restrictie in het aantal mogelijke combinaties met zich meebrengt. In feite zijn er voor de set van gewichten van het NMi slechts 10 mogelijke combinaties (of: *weegvergelijkingen*) mogelijk. Deze worden in Tabel 4.1 weergegeven. De notatie 200 en 200• wordt gebruikt om het onderscheid tussen de twee gewichten met nominale massa 200g te maken. (Analoog geldt dit ook voor de twee gewichten met nominale massa 100g).

Bij een gegeven weegschema kan er een reeks van STS metingen worden gedaan

Weegvergelijking	Standaard	Test
1	1000	500, 200, 200•, 100
2	1000	500, 200, 200•, 100•
3	500	200, 200•, 100
4	500	200, 200•, 100•
5	200, 100	200•, 100•
6	200, 100•	200•, 100
7	200	200•
8	200	100, 100•
9	200•	100, 100•
10	100	100•

Tabel 4.1: Mogelijke combinaties van gewichten (in nominale massa's genoteerd)

voor elke weegvergelijking in het schema. Zodoende krijgen we een reeks van $\Delta\mu_i$, zoals gedefinieerd in (4.3), voor elk van deze combinaties. De $\Delta\mu_i$ kunnen gecombineerd worden in een standaard lineair model. Met behulp van statistische technieken kan er een schatting gegeven worden van de ware massa's van de gewichten uitgedrukt in de gemeten waarden van de $\Delta\mu_i$, alsmede een schatting van de onzekerheid. In deze procedure worden de $\Delta\mu_i$ gebruikt, en niet het (ongewogen) gemiddelde, zoals in de huidige procedure bij het NMi gedaan wordt. Deze aanpassing leidt tot betere schattingen.

Veronderstel nu dat we een optimaal schema willen berekenen met een gegeven aantal weegvergelijkingen, die niet allemaal noodzakelijkerwijs verschillend zijn: een meting herhalen van dezelfde vergelijking in een weegschema kan nuttig zijn, omdat herhalingen extra, onafhankelijke informatie verschaffen. Als deze vergelijkingen uit Tabel 4.1 moeten komen, dan is het aantal weegschema's bestaande uit N vergelijkingen begrensd door 10^N (deze grens is uiteraard niet scherp). Het gevolg hiervan is dat het mogelijk is om de onzekerheid in de massa's van de gewichten door te rekenen voor alle mogelijke weegschema's bestaande uit maximaal 14 vergelijkingen – het maximum aantal opgelegd door het NMi – met behulp van Matlab op een gewone computer.

Het huidige weegschema van het NMi kent 8 weegvergelijkingen uit Tabel 4.1. De vergelijkingen worden gegeven door

$$1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9.$$

Het is onduidelijk hoe dit weegschema, dat dateert uit een tijd waarin alle mogelijke schema's doorrekenen niet mogelijk was, tot stand is gekomen. Met behulp van de hedendaagse moderne computers is het mogelijk om aan te tonen dat dit schema niet optimaal is. Dus het is mogelijk een ander weegschema met 8 weegvergelijkingen te construeren zodanig dat de onzekerheid in de geschatte massa's van de gewichten kleiner is.

Tabel 4.2 geeft de optimale schema's bestaande uit N combinaties ($8 \leq N \leq 14$) weer, waarbij aangenomen wordt dat voor elke weegvergelijking er 20 STS metingen verricht worden.

De onzekerheid in het weegschema van het NMi is $1.1812\,\alpha^2$, waarbij α de con-

N	optimaal weegschema
8	1, 1, 2, 4, 7, 8, 9, 10
9	1, 1, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10
10	1, 1, 2, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10
11	1, 1, 1, 2, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10
12	1, 1, 1, 2, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 10
13	1, 1, 1, 2, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 9, 10, 10
14	1, 1, 1, 2, 2, 3, 4, 4, 7, 8, 8, 9, 10, 10

Tabel 4.2: Optimaal weegschema bestaande uit vergelijkingen uit Tabel 4.1

stante is in (4.1), terwijl de onzekerheid in het optimale schema met 8 vergelijkingen $0.8468\,\alpha^2$ is. Dit betekent dus dat er een reductie van ongeveer 28% in onzekerheid bewerkstelligd kan worden zonder extra metingen te verrichten. Als het aantal weeg-vergelijkingen in het schema verhoogd wordt tot 14, wat overigens extra werk met zich meebrengt, dan kan de onzekerheid tot $0.4655\,\alpha^2$ teruggebracht worden, een reductie van ongeveer 63%. Zoals wel te verwachten is, neemt de onzekerheid af naarmate het aantal weegvergelijkingen in het schema toeneemt.

Het is opvallend dat in geen van de optimale schema's de vergelijkingen 5 en 6 voorkomen, de enige vergelijkingen waarbij de standaard set uit meer dan één gewicht bestaat. Het schema van het NMi bevat deze vergelijkingen wel. In feite bevat geen enkele oplossing binnen 1% van de optimale de vergelijkingen 5 en 6, wat impliceert dat dit geen effect van afrondingsfouten is. In plaats van de vergelijkingen 5 en 6, bevat het optimale schema vergelijkingen 7 en 10. Ga na dat deze samen dezelfde informatie verschaffen als de vergelijkingen 5 en 6 samen. In praktische situaties leidt dit tot een reductie in onzekerheid, vanwege het feit dat vergelijkingen 7 en 10 minder opstapelingen van gewichten vereisen.

Het verhogen van het aantal weegvergelijkingen is niet de enige manier om de onzekerheid te reduceren in de schattingen van de ware massa's. In de nabije toekomst stapt het NMi over op automatische balansen die de STS metingen minder afhankelijk maken van handmatige procedures. Bovendien kunnen er zo ook meer metingen verricht worden in een STS serie.

Het verhogen van het aantal STS metingen per weegvergelijking kan effectiever zijn dan het verhogen van het aantal weegvergelijkingen: het optimale schema bestaande uit 10 vergelijkingen met 30 STS metingen per vergelijking heeft een kleinere onzekerheid ($0.4358\,\alpha^2$) dan het schema met 12 vergelijkingen en 25 STS metingen ($0.4458\,\alpha^2$). In beide gevallen is het aantal metingen in totaal 300. Het verhogen van het aantal STS metingen per weegvergelijking is echter niet altijd de beste aanpak: 10×28 STS metingen leiden tot betere schattingen dan 8×35 metingen.

Andere sets van gewichten

Verschillende massametrologie instituten gebruiken verschillende sets van gewichten. Het resultaat voor de set van gewichten van het NMi, dat bestaat uit gewichten met nominale massa 1000g, 500g, 200g (tweemaal) en 100g (tweemaal), kan gegeneraliseerd worden naar sets die door andere massametrologie instituten gebruikt worden.

Het Duitse metrologie instituut gebruikt bijvoorbeeld een set bestaande uit acht gewichten met 104 mogelijke combinaties. Het berekenen van de onzekerheid voor alle mogelijke schema's was te tijdrovend om binnen de studiegroep door te rekenen. Echter, gebaseerd op de inzichten met de Nederlandse weegschema's werd er besloten om alleen de weegvergelijkingen mee te nemen waarbij de test set uit een enkel gewicht bestond. Het optimale schema in deze vereenvoudigde setting had een onzekerheid die ongeveer 28% kleiner was dan die van het corresponderende schema in gebruik.

Conclusie

Het weegschema dat door het NMi gebruikt wordt is suboptimaal. Door over te gaan naar een ander weegschema, kan de onzekerheid in de massa's van de nationale standaardgewichten gereduceerd worden met ongeveer 63%. Dit weegschema gebruikt weliswaar meer metingen dan het huidige schema. Indien de hoeveelheid werk gelijk gehouden wordt, dan kan er een reductie van 28% gerealiseerd worden.

Het onderzoek, waarover dit artikel rapporteert, is uitgevoerd door Sandjai Bhulai, Thomas Breuer, Eric Cator en Fieke Dekkers. Onze dank gaat uit naar Inge van Andel van het NMi voor de door haar geleverde informatie.