O PAPEL DOS MÍNIMOS QUADRADOS NA DESCOBERTA DOS PLANETAS[1]

Nuno Crato[2]

Um dos problemas maiores com que se sempre debateram os astrónomos foi o da combinação de observações, feitas necessariamente com erro, para a estimação de parâmetros de posição dos corpos celestes. O problema terá sido sentido pelos primeiros a introduzir medidas na astronomia: os astrónomos da Grécia antiga. Tal como muitos outros, Hiparco (c. 180–125 a.C.), que mediu o brilho e posição das estrelas visíveis a olho nu, Eratóstenes (c. 276–194 a.C.), que mediu pela primeira vez o raio da Terra, e Aristarco (c. 310–230 a.C.), que mediu as distâncias relativas do Sol e da Lua, terão reparado que as suas medidas eram falíveis e variavam ligeiramente de momento para momento e de observador para observador. Mas esses astrónomos aceitavam uma medida aproximada, que lhes parecia mais rigorosa, e não se preocupavam com os problemas estatísticos das suas mensurações ou, pelo menos, não escreveram sobre esses problemas.

1 A preocupação renascentista com a medida

Tycho Brahe (1546–1601), o último grande astrónomo da era pré-telescópica, desenvolveu um programa de medida dos céus que ultrapassou em muito o rigor dos antigos. As suas observações sobre a posição dos astros, o movimento dos planetas e as distâncias serviram de base ao trabalho do seu colaborador Johannes Kepler (1571–1630), para o estabelecimento das célebres leis sobre as órbitas dos planetas. Sem as medidas rigorosas de Tycho Brahe, é pouco provável que Kepler pudesse ter estabelecido as leis que levam o seu nome.

Tycho Brahe, homem do renascimento, estava preocupado com a medida. Sabia que o progresso da ciência apenas poderia resultar de um conhecimento empírico mais rigoroso. Essa sua preocupação levou-o a reflectir sobre o rigor das observações. Tycho foi o primeiro, ou um dos primeiros, a perceber esse

[1]Adaptado de uma conferência proferida pelo autor no Museu de Ciência da Universidade de Lisboa. Uma versão ligeiramente mais pormenorizada será simultaneamente publicada no Boletim da Sociedade Portuguesa de Estatística.

[2]Instituto Superior de Economia e Gestão, Lisboa, e Dept. of Math. Sci., New Jersey Institute of Technology, Newark, NJ 07102, USA, ncrato@m.njit.edu

princípio maior da estatística — que tão importante como obter uma estimativa é obter uma ideia do seu rigor. Hoje, esses conceitos estão perfeitamente claros na mente de estatísticos e de cientistas. Fala-se, por exemplo, em estimativa pontual e em variância da estimativa. Esta dualidade de conceitos é tão importante e é tão importante transmiti-la aos que pela primeira vez estudam probabilidades e estatística, que se pode dizer que constitui o aspecto central da estatística moderna.

Tycho Brahe utilizava métodos estatísticos rudimentares, hoje considerados primitivos. Tirava várias medidas de um mesmo parâmetro, juntava essas observações, purgava-as de erros grosseiros (omitia o que hoje chamamos «outliers» ou «observações espúrias»), obtinha médias, que utilizava para as suas estimativas, e acompanhava essas estimativas de uma qualificação do seu rigor. Se, a certo momento, por exemplo, tirava cinco medidas da altura de uma estrela como sendo, em graus, 23, 23, 24, 25 e 25, dizia que a altura era 24 graus, mais grau menos grau. Se, por exemplo, tirava dez medidas da altura de um cometa como sendo, em graus, 20, 21, 21, 23, 24, 24, 25, 27, 27 e 28, dizia que a sua altura era 24 graus, mais ou menos 3 graus. Estava-se ainda longe dos métodos modernos, de utilização de desvios padrões e construção de intervalos de confiança. Mas o sistemático controle da precisão da medida era uma novidade para a época.

O estudo matemático da combinação de observações começou muito mais tarde a ser empreendido de forma sistemática, seguindo o estímulo inicial de Roger Joseph Boscovich (1711–1787). Outros grandes vultos desse estudo foram Pierre Simon, Marquis de Laplace (1749–1827), o «Newton francês», Adrien-Marie Légendre (1752–1833), outro matemático francês, e Carl Friedrich Gauss (1777–1855), o «príncipe dos matemáticos». Foi uma procura que ocupou gerações, tentando encontrar um método ideal de combinação de medidas.

Em particular, tornava-se premente calcular os parâmetros das órbitas dos cometas a partir de medidas pontuais, tiradas em diferentes momentos. O problema é bastante mais difícil do que o do cálculo de uma medida ou parâmetro único como, por exemplo, o peso de um objecto. Mas é à mesma a conjugação de observações diferentes que está em causa; neste caso para a estimação do conjunto de parâmetros que define a órbita de um corpo celeste.

No dobrar do século XVIII para o XIX foram apresentadas várias soluções para este problema (V. Hald 1998 ou Stigler 1986). A solução mais eficaz, e aquela que teria um maior desenvolvimento teórico e maior aplicação prática, seria o método dos mínimos quadrados, publicado por Légendre em 1805 na sua obra *Nouvelles Méthodes pour la Détermination des Orbites des Comètes*, e por Gauss em 1809 na *Theoria Motus Corporum Coelestium*. Com publicações em datas tão próximas, estes dois matemáticos vieram a envolver-se em polémica sobre a autoria da descoberta. Se bem que Légendre tenha divulgado primeiro os seus resultados, sabe-se que Gauss os tinha obtido muito antes, em 1794–1795, pelo que hoje se atribui a este último a prioridade da criação do método (V. Plackett 1972).

2 Gauss determina a órbita de Ceres

Gauss é chamado a resolver o problema da estimação de uma órbita numa ocasião decisiva para o progresso da astronomia. Em 1 de Janeiro de 1801, Giuseppi Piazzi (1746–1826), director do Observatório de Palermo, tinha descoberto o asteróide Ceres, que na altura se pensou ser um planeta em falta, entre Marte e Júpiter. Seria o planeta que há muito se procurava e que iria completar o sistema solar. No entanto, em 11 de Fevereiro, depois de Piazzi ter conseguido registar apenas 10 observações desse corpo celeste, Ceres desapareceu, ofuscado pelo Sol.

Passaram-se semanas e o astrónomo de Palermo não conseguiu reencontrar Ceres quando este deveria ter aparecido do outro lado do Sol. Ao que parece, Piazzi estava preocupado com a concorrência de outros astrónomos e queria assegurar a prioridade da descoberta, pelo que apenas queria divulgar os seus dados depois de voltar a encontrar Ceres e calcular com precisão a sua órbita (V. Sheehan 1992, pp. 102-106). Não o conseguindo, foi obrigado a divulgar as suas observações e a confessar a sua dificuldade em reencontrar o objecto celeste. Mas só o fez sete meses depois da descoberta. Numa carta para o astrónomo alemão Johann Bode (1747–1826), escrita no princípio de 1801, refere-se ao seu achado como tratando-se de um cometa, e apenas aos seus colaboradores mais próximos revelou a suspeita de se tratar do almejado planeta. Entretanto, outros astrónomos procuraram reencontrar o «cometa» de Piazzi. No verão de 1801, William Herschel (1738–1822), que em 1781 tinha descoberto o planeta Urano, juntou-se à corrida pela descoberta. Tornava-se claro que as poucas observações registadas pelo astrónomo de Palermo não eram suficientes para calcular a sua órbita com a necessária precisão. Até à data, os métodos utilizados pelos matemáticos e astrónomos necessitavam de muito mais observações e espalhadas ao longo de um período muito mais longo.

Foi então que entrou em cena um matemático alemão, na altura com 24 anos, mas já então considerado um dos maiores génios da história da matemática: Carl Friedrich Gauss. O jovem Gauss exultou com a possibilidade de pôr em prática os seus estudos teóricos, pois já há alguns anos que tinha vindo a estudar o problema do cálculo de órbitas «sem quaisquer pressupostos teóricos, a partir de observações que não englobassem um período de tempo longo», como escreveu na altura (Cf. Taff 1985, p. 220). Mais tarde, em *Theoria Motus*, voltaria a explicar a importância da oportunidade que Ceres lhe proporcionou.

> «a descoberta de um novo planeta, no primeiro dia de Janeiro desse ano com o telescópio de Palermo, era o tema universal de conversa [...] Em altura alguma nos anais da astronomia nos encontrámos perante tão grande oportunidade — e oportunidade maior será difícil de imaginar — para mostrar tão claramente a importância deste problema [...] quando todas as esperanças de descoberta nos céus deste planeta atómico [minúsculo], no meio de estrelas inumeráveis e depois de ter passado um ano, repousavam apenas num conhecimento muito aproximado, baseado em poucas observações.» (citado por Sheehan 1992, p. 105).

Gauss determinou uma órbita para Ceres com base num método que não se conhece exactamente e que se suspeita não ser o método que acabaria por desenvolver. O que é certo, é que os seus estudos o levaram a estabelecer um método de combinar observações e, com base nelas, estimar os parâmetros de uma função — neste caso uma órbita. Esse método veio a ser conhecido como o método dos mínimos quadrados e resolveu um problema com o qual há décadas se debatiam as melhores mentes europeias.

Os cálculos de Gauss forneceram estimativas para a órbita de Ceres com precisão suficiente para o astrónomo húngaro Franz Xaver von Zach, na altura director do Observatório de Seeburgo o redescobrir a 31 de Dezembro de 1801, praticamente um ano depois de Piazzi o ter encontrado. O asteróide encontrava-se a meio grau de distância angular da posição prevista por Gauss. Na noite seguinte, foi o astrónomo alemão Heinrich Olbers (1758–1840) que visualizou Ceres.

3 Porquê os mínimos quadrados?

Vale a pena reproduzir sinteticamente — e com inevitáveis simplificações — o processo com que Gauss derivou o seu método (V. Plackett 1972, Hald 1998 e Stigler 1986). Qual era exactamente a natureza do problema, na sua forma mais simples, tal como Tycho Brahe e outros o tinham defrontado? Era a estimação de um parâmetro único, por exemplo, a altura de uma estrela em determinado momento e em determinado local, com base em medidas repetidas com valores ligeiramente diferentes. Para simplificar ainda mais, considere-se a medida do peso de um objecto, efectuado várias vezes pela mesma balança. É de esperar que as medidas não sejam todas absolutamente idênticas e que haja pequenas diferenças, pois todas as medidas são tiradas com erro.

O método mais usual para combinar essas observações e obter uma estimativa mais fiável do peso do objecto é o de tirar uma média aritmética das diferentes medidas e utilizar essa média como a melhor estimativa que essas observações permitem obter. Este método é utilizado há séculos e era utilizado há séculos quando Gauss estudou o problema da determinação das órbitas. Nas suas próprias palavras,

> «tem sido costume encarar como um axioma a hipótese de que, se uma quantidade foi determinada por várias observações directas, feitas nas mesmas circunstâncias e com igual cuidado, então a média aritmética dos valores observados fornece o valor mais provável, se não rigorosamente, pelo menos com grande aproximação» (citado por Farebrother 1999, p. 78).

Qual seria a razão estatística e probabilística, perguntou Gauss, que levaria a utilizar esse método e não outro? E seria possível generalizar os princípios desse método a um problema mais complexo, como o da determinação simultânea de vários parâmetros, tais como os parâmetros de uma órbita?

As perguntas parecem ingénuas, mas a verdade é que, ainda hoje, se encontra muita gente culta e com formação científica e matemática que não sabe as respostas. Nestas perguntas está a chave do desenvolvimento do método dos mínimos quadrados.

Há pelo menos duas linhas básicas para ataque ao problema; e Gauss seguiu as duas. A primeira, mais elementar, consiste em perguntar qual é a função perca, ou qual é a métrica, que leva a escolher a média aritmética. A segunda, mais complexa, consiste em perguntar qual é a distribuição dos erros que leva a que a média forneça a estimativa óptima.

A primeira linha de ataque pretende determinar em que sentido a média fornece a aproximação óptima a um conjunto de observações. Trata-se de uma questão estatística ou matemática, que não envolve qualquer abordagem probabilística. Regressando ao exemplo do peso, admita-se que três medidas sucessivas xı obtêm 21, 21 e 18 kg. A média é $\bar{x} = 20$. Considerem-se agora duas medidas diferentes da proximidade desta estimativa às três observações. Podem-se considerar os desvios, «medidos todos com sinal positivo», como se dizia no tempo de Gauss e como o recomendava Laplace. Esses desvios são 1, 1 e 2. A soma desses desvios absolutos é $\sum |x_i - \bar{x}| = 4$. No entanto, se se considerar uma outra estimativa, a mediana, $\tilde{x} = 21$, por exemplo, consegue-se obter uma maior proximidade: $\sum |x_i - \tilde{x}| = 3$, pelo que a mediana parece fornecer uma estimativa preferível.

x_i	$\bar{x}$	$\tilde{x}$	$\lvert x_i - \bar{x}\rvert$	$\lvert x_i - \tilde{x}\rvert$	$(x_i - \bar{x})^2$	$(x_i - \tilde{x})^2$
21	20	21	1	0	1	0
21	20	21	1	0	1	0
18	20	21	2	3	4	9
$\sum$			4	3	6	9

Table 1: A média aritmética $\bar{x}$ minimiza a soma dos quadrados dos desvios, enquanto a mediana $\tilde{x}$ minimiza a soma dos desvios absolutos.

A situação inverte-se quando se considera o critério dos mínimos quadrados. As somas dos erros quadrados são $\sum(x_i - \bar{x})^2 = 6$, no caso da média e $\sum(x_i - \tilde{x})^2 = 9$, no caso da mediana.

Este simples exemplo apenas ilustra uma propriedade fácil de demonstrar: *dado um conjunto de observações, a média aritmética é o valor que minimiza a soma dos quadrados dos desvios (enquanto a mediana minimiza a soma dos desvios absolutos).*

Gauss observou esta propriedade da média e perguntou-se se não a poderia generalizar a outro tipo de estimadores. Se a média aritmética se tinha revelado como uma medida de localização muito útil e eficaz, seria desejável encontrar estimadores que tivessem a mesma propriedade, isto é, que minimizassem igualmente os quadrados dos erros. No caso da determinação de órbitas, por exemplo, seria útil encontrar processos de estimar os parâmetros das trajectórias, de forma a que as diferenças entre as observações e as órbitas estimadas fossem mínimas, no sentido dos mínimos quadrados. Gauss derivou então as equações que determinavam os parâmetros óptimos das funções segundo esse critério. O método dos mínimos quadrados encontrado segundo este processo é um *método estatístico sem fundamentação probabilística*. Não há qualquer raciocínio nem qualquer pressuposto que incida sobre o carácter da aleatoriedade das medidas.

Mas Gauss foi mais longe. Perguntou-se o que se passaria com os erros que tornasse óptimo esse método. Ou seja, voltando ao exemplo dos pesos e sabendo que o peso do objecto em causa é constante, os erros nas observações deverão ter uma determinada distribuição de probabilidades. Qual será a distribuição desses erros que faz com que a estimativa dada pela média seja a que com maior probabilidade se aproxima do verdadeiro peso? Por outras palavras, qual a distribuição dos erros que faz do método dos mínimos quadrados o método óptimo. O que Gauss perguntava a si mesmo era *qual a distribuição que faria com que os estimadores dos mínimos quadrados fornecessem a moda*, o valor mais provável dos verdadeiros parâmetros, se os virmos como quantidades aleatórias.

O raciocínio de Gauss levou-o a uma distribuição de probabilidade que justifica matematicamente o uso da média aritmética e do método dos mínimos quadrados. Essa distribuição é a normal ou distribuição de Gauss, bem conhecida pela sua forma simétrica e pelas suas abas, com um aspecto gráfico que relembra um sino.

Chegado a este ponto, Gauss encontra uma outra justificação para o uso dos mínimos quadrados. É que a lei normal aparece como limite da distribuição de erros independentes, fornecendo uma boa aproximação quando estes são da ordem das várias dezenas. É o célebre Teorema do Limite Central, talvez o resultado mais importante de toda a teoria das probabilidades.

> «Quando a lei do erro é desconhecida é impossível encontrar o resultado mais provável[...]. Chegamos ao método dos mínimos quadrados, independentemente da lei dos erros, quando o número de observações é suficientemente largo. Mas, com um número moderado de observações, fica-se completamente no escuro se a lei do erro é de-

sconhecida». Carta de Gauss a Olbers, 22 de Fevereiro de l819, (citado por Plackett, 1972).

Alguns anos mais tarde, em 1839, Gauss generaliza o método dos mínimos quadrados e coloca o problema da estimação em outra das bases teóricas fundamentalmente admissíveis, a da minimização de uma forma funcional dos erros. Pode mesmo dizer-se que Gauss, numa carta a Bessel datada de 28 de Fevereiro desse ano, prefigura o ponto de vista da teoria da decisão. Vale a pena citar um extracto completo dessa carta.

> «é menos importante determinar o valor do parâmetro para o qual a probabilidade é maior, ainda que infinitamente pequena, do que aquele valor no qual nos apoiando jogamos o menos desvantajoso jogo; ora, se fa denota a probabilidade de a incógnita x ter o valor a, então é menos importante que fa tenha um máximo do que $\int fx\,F(x-a)\,dx$, tomado sobre todos os valores possíveis de x, seja um mínimo, onde para F é escolhida uma função que seja sempre positiva e que seja sempre crescente com argumentos crescentes, de uma forma apropriada. Escolher o quadrado para esta função é puramente arbitrário e essa arbitrariedade está na natureza do tema. Não fossem conhecidas as largas vantagens da escolha do quadrado e qualquer outra função poderia ser escolhida.»

4 Os planetas extra-solares

Duzentos anos depois da derivação de Gauss, o método dos mínimos quadrados voltou a ser decisivo para uma descoberta astronómica de alcance semelhante ao da descoberta do primeiro asteróide. Trata-se da descoberta dos planetas que orbitam outras estrelas que não o nosso Sol. Conhecem-se hoje duas dezenas de planetas que orbitam estrelas afastadas. Essa descoberta deve-se a extraordinários progressos na técnica da espectroscopia e, mais uma vez, ao método dos mínimos quadrados.

Ninguém ainda observou visualmente um planeta extra-solar, o que é impossível com a actual tecnologia. No entanto, a existência de vários destes planetas é hoje aceite pelos astrónomos, com base em medidas muito precisas de oscilações periódicas da velocidade de algumas estrelas.

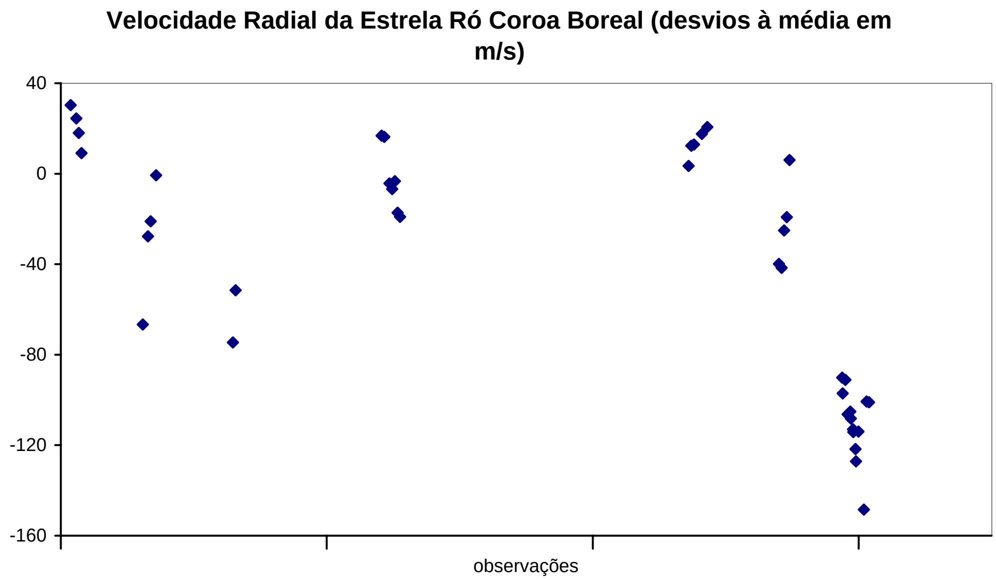

Figure 1: Dados de Noyes *et al.* 1997.

Todas estas medições baseiam-se no chamado efeito de Doppler, assim denominado em referência ao físico austríaco que primeiro o formulou claramente. Num trabalho publicado em 1842, Christian Johann Doppler (1803–53), então professor em Praga, explicou que a frequência observada da energia ondulatória varia conforme a fonte se aproxima ou se afasta do observador. Assim, por exemplo, um observador parado junto a uma linha de caminho de ferro nota que a frequência do silvo de um combóio é diferente conforme este se aproxima ou se afasta do observador. Quando o combóio se aproxima, o silvo é mais agudo; quando se afasta, é mais grave. O mesmo fenómeno se passa com a luz. Se uma estrela se aproxima de nós, a sua luz desloca-se para o azul, que corresponde a frequências mais elevadas. Se a estrela se afasta, a luz que observamos desloca-se para o vermelho, que corresponde a frequências mais baixas. O efeito de Doppler tem sido profusamente utilizado em astronomia para medir as deslocações relativas das estrelas e a expansão do universo. É a medição rigorosa deste efeito que tem permitido detectar as oscilações de algumas estrela e daí deduzir que essas oscilações são devidas à atracção de planetas que as circundam.

Os novos espectrógrafos são extraordinariamente precisos. Conseguem detectar variações na velocidade radial (na direcção estrela-observador) da ordem dos 10 metros por segundo (36 quilómetros por hora). Como elemento de comparação, sabe-se que Júpiter provoca oscilações no nosso Sol com uma velocidade da ordem dos 12 metros por segundo (43,2 quilómetros por hora), pelo que é perfeitamente possível detectar planetas mais massivos ou orbitando uma estrela a distância mais reduzida.

Utilizando as leis da mecânica celeste e tendo calculado o período orbital, pode-se estimar a distância a que um planeta orbita uma estrela. Considerando a massa da estrela e a velocidade das suas oscilações, pode estimar-se a massa do planeta em causa.

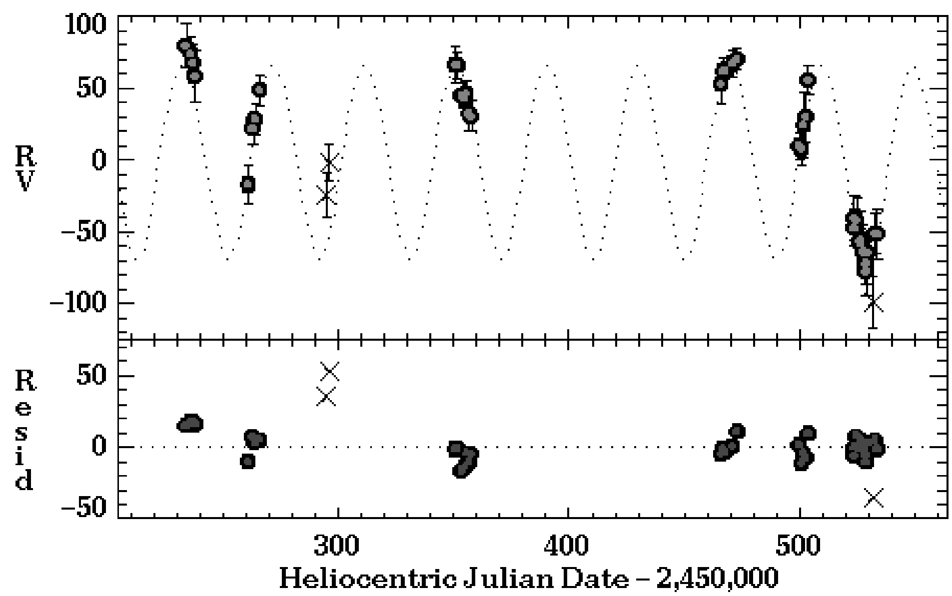

Figure 2: Reproduzido de Noyes *et al.* 1997.

Não se tem acesso aos dados de Piazzi que Gauss utilizou e é muito provável que estejam irremediavelmente perdidos. Mas os dados que revelaram a existência de planetas extra-solares são fáceis de obter a partir dos trabalhos originais. A Figura 1 mostra as medidas da velocidade radial da estrela Ró da constelação Coroa Boreal, que foram obtidas por Noyes *et al.* 1997. À primeira vista, nada se observa. Poderá mesmo admitir-se que as medidas de velocidade parecem estar distribuídas aleatoriamente e sem obedecer a nenhum padrão.

No entanto, aplicando um método de regressão não linear que encontra a sinusóide mais próxima no sentido dos mínimos quadrados, revela-se um padrão de oscilações muito nítido. A evidência visual da existência de oscilações periódicas é gritante. Com a análise dessas oscilações,os astrónomos puderam inferir da existência de um planeta orbitando esta estrela, assim como puderam estudar muitas das suas características. Dois séculos depois da sua descoberta, o método dos mínimos quadrados continua a prestar serviços inestimáveis à astronomia.

Referências

Baum, Richard e Sheehan. William. *In Search of Planet Vulcan: The Host in Newton's Clockwork Universe.* Nova Iorque: Plenum; 1997.

Farebrother, Richard William. *Fitting Linear Relationships: A History of the Calculus of Observations 1750–1900.* Nova Iorque: Springer; 1999.

Grosser, Morton. *The Discovery of Neptun*e. Nova Iorque: Dover; 1979. Reimpressão, publicado originalmente em 1962 por Harvard University Press.

Hald, Anders. *A History of Mathematical Statistics from 1750 to 1930.* Nova Iorque: Wiley; 1998.

Levy, David H. *Clyde Tombaugh Discoverer of Planet Pluto.* Tucson, Arizona: The University of Arizona Press; 1991.

Noyes, Robert W. et al. "A Planet Orbiting the Star Rho Coronae Borealis", *Astrophysical Journal* 483, p. L111; 1997.

Pannekoek, Anton. *A History of Astronomy.* Mineola, Nova Iorque: Dover; 1989. Reimpressão, publicado originalmente em George Allen and Unwin Ltd; 1961.

Plackett, R. L., "The discovery of the method of least squares", *Biometrika* 59, 239–251; 1972.

Sheehan, William. *The Planet Mars: A History of Observation and Discovery*. Tucson, Arizona: University of Arizona Press; 1996.

Sheehan, William. *Worlds in the Sky: Planetary Discovery from Earliest Times through Voyager and Magellan.* Tucson, Arizona: University of Arizona Press; 1992.

Stern, Alan and Mitton, Jacqueline. *Pluto and Charon: Ice Worlds on the Ragged Edge of the Solar System.* Nova Iorque: Wiley; 1998.

Stigler, Stephen M. *The History of Statistics: The Measurement of Uncertainty before 1900.* Cambridge, Massachusetts: Harvard University Press; 1986.

Taff, Lawrence G. *Celestial Mechanics.* Nova Iorque: Wiley; 1985.