

пространството. Затова нека допуснем, че центърът на множеството съвпада с центъра на координатната система $\sum_{r=1}^n x_{ri} = 0, i = 1 \dots p$.

Тогава $d_{rs}^2 = x_r^T x_r + x_s^T x_s - 2x_s^T x_r$, откъдето чрез сумиране по съответните индекси получаваме:

$$\frac{1}{n} \sum_{r=1}^n d_{rs}^2 = \frac{1}{n} \sum_{r=1}^n x_r^T x_r + x_s^T x_s;$$

$$\frac{1}{n} \sum_{s=1}^n d_{rs}^2 = x_s^T x_s + \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n x_s^T x_s;$$

$$\frac{1}{n^2} \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n d_{rs}^2 = \frac{2}{n} \sum_{r=1}^n x_r^T x_r.$$

Сумирайки тези три равенства, получаваме:

$$x_r^T x_r = -\frac{1}{2} \left(d_{rs}^2 - \frac{1}{n} \sum_{r=1}^n d_{rs}^2 - \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n d_{rs}^2 + \frac{1}{n^2} \sum_{r=1}^n \sum_{s=1}^n d_{rs}^2 \right). \quad (1)$$

Да означим с $A = \left\{ -\frac{1}{2} d_{rs}^2 \right\}$ матрицата от квадратите на разстоянията и нека $H = I_n - \frac{1}{2} 11^T$, където I_n е матрица с n и n стълба, всички елементи на която са нули, с изключение на тези по главния диагонал, които са единици. С $1 = (1 \dots 1)^T$ означаваме вектор, състоящ се от единици. Следователно, записвайки (1) в матричен вид, получаваме уравнението $XX^T = HAH$, където рангът на матрицата е равен на размерността на пространството: $\text{rank}(XX^T) = \text{rank}(X) = p$. Ако XX^T е положителна и полуопределена с ранг p , то можем да се възползваме от разлагането $XX^T = V\Lambda V^T$, където $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1 \dots \lambda_n)$ е диагоналната матрица от собствените стойности, $\lambda_i, i = 1 \dots n$, а V е матрицата от собствените вектори.

Тогава проекциите на точките $x_r, r = 1 \dots n$ по съответните направления на пространството могат да се изразят чрез $X = V_1 \Lambda_1^{\frac{1}{2}}$, където Λ_1 е матрицата от ненулевите собствени стойности и V_1 е матрицата от съответните собствени вектори.

Всичко това може да бъде обобщено в алгоритъма:

1. Определяме разстоянията между точките $\{d_{rs}\}$.