

Да означим с $x_0 = \frac{1}{n} \sum_{r=1}^n x_r$ и $y_0 = \frac{1}{n} \sum_{r=1}^n y_r$ центровете на двете извадки. Тогава имаме:

$$R^2 = \sum_{r=1}^n \left((y_r - y_0) - \rho A^T (x_r - x_0) \right)^T \left((y_r - y_0) - \rho A^T (x_r - x_0) \right) + n \left(y_0 - \rho A^T x_0 - b \right)^T \left(y_0 - \rho A^T x_0 - b \right).$$

Тъй като последното събираемо е положително, функцията приема минимална стойност, ако $b = y_0 - \rho A^T x_0$. Тогава $x_r = \rho A^T (x_r - x_0) + y_0$.

За да намерим оптималната хомотетия ρ , нека допуснем, че $x_0 = y_0 = 0$. Тогава $R^2 = \text{tr}(YY^T) + \rho^2 \text{tr}(XX^T) - 2\rho \text{tr}(XAY^T)$. Стойността на ρ , която минимизира R^2 , е $\hat{\rho} = \frac{\text{tr}(XAY^T)}{\text{tr}(XX^T)}$, където с tr означаваме

сумата на елементите, разположени по главния диагонал на матрицата.

Оптималната ротация е разгледана от Sibson (1978). R^2 ще приема минимална стойност, ако $\text{tr}(XAY^T) = \text{tr}(AXY^T)$ е максимално. Нека означим с $C = Y^T X$ и приложим разлагането $C = U\Lambda V^T$, където U и V са ортогонални матрици. Тогава $\text{tr}(AC) = \text{tr}(AU\Lambda V^T) = \text{tr}(V^T AU\Lambda)$. Тъй като $V^T AU$ е ортонормална, имаме че $\text{tr}(V^T AU\Lambda) \leq \text{tr}(\Lambda)$. Следователно R^2 ще приема минимална стойност, когато $\text{tr}(AC) = \text{tr}(\Lambda)$, което е еквивалентно $V^T AU\Lambda = \Lambda$. Така получаваме представянето $A = VU^T$. Умножавайки от ляво и дясно с V и V^T съответно, получаваме $AU\Lambda V^T = V\Lambda V^T$. Следователно

$$AC = V\Lambda V^T = (V\Lambda^2 V^T)^{\frac{1}{2}} = (V\Lambda U U^T \Lambda V^T)^{\frac{1}{2}} = (C^T C)^{\frac{1}{2}}.$$

Тогава матрицата A се представя чрез

$$A = (C^T C)^{\frac{1}{2}} C^{-1} = (X^T Y Y X)^{\frac{1}{2}} (Y^T X)^{-1},$$

когато $Y^T X$ не е сингулярна, и чрез решението на $AC = (C^T C)$ - в противен случай.

Така можем да обобщим алгоритъма:

1. От точките от двете множества изваждаме средната стойност на съответното множество, така че центърът на множество-