Gegeben: $\mathbf{M} = (\mathbf{x}_1 | \cdots | \mathbf{x}_p)$ mit $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \ldots, x_{in})' \in \mathbb{R}^n$

Gesucht: Empirische Kovarianzmatrix und Korrelationsmatrix:

$$\widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) = (\hat{\sigma}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{1 \leq i,j \leq p} \qquad \text{bzw.} \qquad \widehat{\mathrm{Cor}}(\mathbf{M}) = (\hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{1 \leq i,j \leq p}\,,$$

wobei

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &= \frac{1}{n-1} \sum_{r=1}^{n} (x_{ir} - \bar{x}_{i\cdot})\,(x_{jr} - \bar{x}_{j\cdot}) \\
&= \frac{1}{n-1} \left( \mathbf{x}_i - \mathbf{1}_n \left( \frac{1}{n} \mathbf{1}_n' \mathbf{x}_i \right) \right)' \left( \mathbf{x}_j - \mathbf{1}_n \left( \frac{1}{n} \mathbf{1}_n' \mathbf{x}_j \right) \right) \\
&= \frac{1}{n-1} \mathbf{x}_i' \left( \mathbf{I}_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' \right) \left( \mathbf{I}_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' \right) \mathbf{x}_j = \frac{1}{n-1} \mathbf{x}_i' \left( \mathbf{I}_n - \frac{1}{n} \mathbf{J}_n \right) \mathbf{x}_j,
\end{aligned}$$

denn $\left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{J}_n\right)$ ist idempotent mit $\mathbf{J}_n \equiv \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n' = \begin{pmatrix} 1 & \ldots & 1 \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & \ldots & 1 \end{pmatrix}$.

Daraus folgt einerseits: $\widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) = \dfrac{1}{n-1} \mathbf{M}' \left( \mathbf{I}_n - \dfrac{1}{n} \mathbf{J}_n \right) \mathbf{M}$ .

Und wegen $\hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \dfrac{\hat{\sigma}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}{\sqrt{\hat{\sigma}^2(\mathbf{x}_i) \cdot \hat{\sigma}^2(\mathbf{x}_j)}}$

ist andererseits:

$$\widehat{\mathrm{Cor}}(\mathbf{M}) = \left( \hat{\sigma}(\mathbf{x}_i)^{-1} \cdot \hat{\sigma}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \cdot \hat{\sigma}(\mathbf{x}_j)^{-1} \right)_{1 \leq i,j \leq p}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{\sigma}(\mathbf{x}_1)^{-1} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}(\mathbf{x}_2)^{-1} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ldots & 0 & \hat{\sigma}(\mathbf{x}_n)^{-1} \end{pmatrix} \cdot \widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) \cdot \begin{pmatrix} \hat{\sigma}(\mathbf{x}_1)^{-1} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}(\mathbf{x}_2)^{-1} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ldots & 0 & \hat{\sigma}(\mathbf{x}_n)^{-1} \end{pmatrix}$$

$$= \left\{ \mathrm{Diag}\left( \widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) \right) \right\}^{-1/2} \cdot \widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) \cdot \left\{ \mathrm{Diag}\left( \widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) \right) \right\}^{-1/2},$$

denn $\hat{\sigma}^2(\mathbf{x}_i) = \hat{\sigma}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i)$ und wobei $\mathrm{Diag}(A)$ zu einer quadratischen Matrix $A$ die Diagonalmatrix sei, die dieselbe Diagonale wie $A$ hat, und $B^{-1/2}$ für die Matrix $B$ hier *elementweise* interpretiert wird.

Andere Darstellung: Ist $\mathrm{diag}(A)$ zu einer quadratischen Matrix $A$ der *Vektor* ihrer Diagonalelemente, so erhält man die Matrix der Nenner von $(\hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{1 \leq j,i \leq p}$ durch das äußere Produkt

$$\left\{ \mathrm{diag}\left( \widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) \right) \cdot \left( \mathrm{diag}\left( \widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M}) \right) \right)' \right\}^{1/2},$$

falls $B^{1/2}$ für die Matrix $B$ hier *elementweise* interpretiert wird. ($\widehat{\mathrm{Cov}}(\mathbf{M})$ kann dann bei elementweiser Interpretation der Division durch diese Matrix „dividiert“ werden.)