$\{\mu,\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\Psi}\}$を**構造母数**(structural parameter)と呼ぶ．このモデルは集団としての構造よりも特定の個体により関心がある場合に適当なモデルである．また，ランダム・モデルにおける共通因子の不確定性の困難を避けるためのモデルと考えることもできる．

$\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N]^t$, $\boldsymbol{F}=[\boldsymbol{f}_1,\cdots,\boldsymbol{f}_N]^t$, $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\cdots,\boldsymbol{u}_N]^t$ とおくとき

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{1}_N\boldsymbol{\mu}^t+\boldsymbol{F}\boldsymbol{\Lambda}^t+\boldsymbol{U}$$

と表わすことができる．$\boldsymbol{f}_j$ についての条件は $\boldsymbol{F}^t\boldsymbol{1}_N=\boldsymbol{0}$, $(1/N)\boldsymbol{F}^t\boldsymbol{F}=\boldsymbol{I}_k$ となる．$\boldsymbol{u}_j$, $j=1,\cdots,N$ に正規性を仮定したとき，尤度関数はいくらでも大きい値をとることができることが知られている．したがって，最尤推定量は存在せず，その代り推定を2段階に分けて行う次の推定法がある．まず$(\mu,\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\Psi})$を推定し，その後で$\boldsymbol{F}$を推定する方法である．$\boldsymbol{\mu}$の自然な推定量は$\bar{\boldsymbol{x}}$である．また，$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{E}(\boldsymbol{S})=(n/N)\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{\Lambda}^t+\boldsymbol{\Psi}$ であるから，ランダム・モデルの場合と同様な方法によって，$\boldsymbol{S}$から$(\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\Psi})$を推定することができる．一方，$(\mu,\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\Psi})$を既知とすると，$\boldsymbol{F}$の推定量としては

回帰推定量：$\boldsymbol{F}_R=(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{1}_N\boldsymbol{\mu}^t)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\Lambda}$

バートレット推定量：

$$\boldsymbol{F}_B=(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{1}_N\boldsymbol{\mu}^t)\boldsymbol{\Psi}^{-1}\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{\Lambda}^t\boldsymbol{\Psi}^{-1}\boldsymbol{\Lambda})^{-1}$$

の2種類が提案されている．$(\mu,\boldsymbol{\Lambda},\boldsymbol{\Psi})$が未知の場合は，データから，推定量$(\hat{\mu},\hat{\boldsymbol{\Lambda}},\hat{\boldsymbol{\Psi}})$を求め，これらを$\boldsymbol{F}_R,\boldsymbol{F}_B$に代入することによって推定量$\hat{\boldsymbol{F}}_R,\hat{\boldsymbol{F}}_B$を定義することができる．

12.5　正準相関分析

2つの確率ベクトル $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_p)^t$ および $\boldsymbol{y}=(y_1,\cdots,y_q)^t$ との間の相関関係を最も簡潔に表現するための方法がホテリング(H. Hotelling [1936])によって導入された．一般性を失うことなく，$p\leqq q$ とし

$$\mathrm{V}\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ \boldsymbol{y}\end{bmatrix}\right)=\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12}\\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22}\end{bmatrix}$$

とする．$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$の1次結合

$$\xi=\boldsymbol{\alpha}^t\boldsymbol{x},\quad \eta=\boldsymbol{\beta}^t\boldsymbol{y},\quad \mathrm{V}(\xi)=\mathrm{V}(\eta)=1$$

のうちで，次の性質 i), ii), iii)をみたす**正準変量**(canonical variate)と呼ばれるいくつかの変量

$$\xi_i=\boldsymbol{\alpha}_i^t\boldsymbol{x},\quad i=1,\cdots,p$$

$$\eta_j=\boldsymbol{\beta}_j^t\boldsymbol{y},\quad j=1,\cdots,q$$

を定める．

i) $\rho(\xi_1,\eta_1)=\max_{\alpha,\beta}\rho(\xi,\eta)$,

ii) $k\leqq p$ のとき，条件 $\rho(\xi,\xi_i)=\rho(\eta,\eta_i)=0$, $i=1,\cdots,k-1$ のもとで $\rho(\xi,\eta)$が(ξ_k,η_k)で $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ に関して最大になる，

iii) $k>p$ のとき，$\rho(\eta_k,\eta_i)=0$, $i=1,\cdots,k-1$.

さて，$\rho(\xi_i,\eta_i)=\rho_i$,　$i=1,\cdots,p$, とおけば，$\rho_1\geqq\cdots\geqq\rho_p\geqq 0$ は固有方程式

$$|\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}-\rho^2\boldsymbol{\Sigma}_{11}|=0$$

の解である．また，係数ベクトル $\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\beta}_j$ はそれぞれ固有値問題

$$\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\alpha}_i=\rho_i^2\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_i,\ \boldsymbol{\alpha}_i^t\boldsymbol{\Sigma}_{11}\boldsymbol{\alpha}_j=\delta_{ij}\qquad(1)$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\beta}_j=\rho_j^2\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\beta}_j,\ \boldsymbol{\beta}_i^t\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\beta}_j=\delta_{ij}\qquad(2)$$

の解である．ρ_iを第i**正準相関係数**(canonical correlation coefficient)，または，単に第i**正準相関**，ξ_i,η_iをそれぞれ$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$の第$i$正準変量，$\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\beta}_i$を$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$の第$i$**正準ベクトル**という．正準相関係数は一意的に定まる．正準ベクトル$\boldsymbol{\alpha}_i,\boldsymbol{\beta}_i$は$\rho_i$が単根であれば符号を除いて一意的であるが，$\rho_i$が重根の場合は一意的でない．$p=1$のときの正準相関係数$\rho_1$は，$x_1$と$\boldsymbol{y}$との間の重相関係数(→ I. 12.2)である．$\boldsymbol{D}_\rho=\mathrm{Diag}(\rho_1,\cdots,\rho_p)$, $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{\alpha}_1,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_p]$, および $\boldsymbol{B}=[\boldsymbol{\beta}_1,\cdots,\boldsymbol{\beta}_q]$とおくとき，正準変量ベクトル

$$\boldsymbol{\xi}=(\xi_1,\cdots,\xi_p)^t=\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{\eta}=(\eta_1,\cdots,\eta_q)^t=\boldsymbol{B}^t\boldsymbol{y}$$

の分散共分散行列は

$$\mathrm{V}\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{\xi}\\ \boldsymbol{\eta}\end{bmatrix}\right)=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_p & \boldsymbol{P}\\ \boldsymbol{P}^t & \boldsymbol{I}_q\end{bmatrix},\ \boldsymbol{P}=[\boldsymbol{D}_\rho,\boldsymbol{O}]$$

となる．正準変量のp個の対$(\xi_1,\eta_1),\cdots,(\xi_p,\eta_p)$同士は無相関であり，$\rho_1,\cdots,\rho_p$は正準化した$\boldsymbol{x}$と$\boldsymbol{y}$との相関関係を表わしている．$\mathrm{rank}(\boldsymbol{\Sigma}_{12})=k$ ならば $\rho_{k+1}=\cdots=\rho_p=0$ であるから，最初のk個の正準変量のみが意味をもち，一般に

$$\sum_{i=1}^{k}\rho_i^2\Big/\sum_{i=1}^{p}\rho_i^2=\sum_{i=1}^{k}\rho_i^2\Big/\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})$$

を最初のk個の正準変量の**累積寄与率**という．正準相関係数，正準ベクトルは尺度変換†によって不変である．$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$をそれぞれ尺度変換した変量を$\boldsymbol{x}^*,\boldsymbol{y}^*$とし，$\boldsymbol{x}^*$と$\boldsymbol{y}^*$の間の第$i$正準相関係数，正準ベクトルをそれぞれ$\rho_i^*,\boldsymbol{\alpha}_i^*,\boldsymbol{\beta}_i^*$とする．このとき

$$\rho_i=\rho_i^*,\quad \boldsymbol{\alpha}_i^t\boldsymbol{x}_i=\boldsymbol{\alpha}_i^{*t}\boldsymbol{x}_i^*,\quad \boldsymbol{\beta}_i^t\boldsymbol{y}_i=\boldsymbol{\beta}_i^{*t}\boldsymbol{y}_i^*$$

が成り立つ．したがって，変量$\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$を基準化した変量に対して正準相関分析を適用しても本質的に同じ結果が得られる．正準相関分析は行列$\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}$の特異値分解†と関係している．$\boldsymbol{\Psi}$の特異値分解を

$$\boldsymbol{\Psi}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}_2^t,\quad \boldsymbol{Q}_1^t\boldsymbol{Q}_1=\boldsymbol{I}_p,\quad \boldsymbol{Q}_2^t\boldsymbol{Q}_2=\boldsymbol{I}_q$$

とするとき

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1/2}\boldsymbol{Q}_1,\quad \boldsymbol{B}=\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1/2}\boldsymbol{Q}_2$$

が成り立つ．

標本が与えられたときの標本正準相関係数は

$\boldsymbol{\Sigma}$の代りに標本分散共分散行列† $\boldsymbol{S}$を用いて定義される．大きさ $N=n+1$ の標本にもとづく標本分散共分散行列$\boldsymbol{S}$を

$$\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{S}_{11} & \boldsymbol{S}_{12}\\ \boldsymbol{S}_{21} & \boldsymbol{S}_{22}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{S}_{11}:p\times p,\quad \boldsymbol{S}_{22}:q\times q$$

とする．固有方程式

$$|\boldsymbol{S}_{12}\boldsymbol{S}_{22}^{-1}\boldsymbol{S}_{21}-r^2\boldsymbol{S}_{11}|=0$$

の i 番目に大きい解の非負の平方根r_iを，第 i **標本正準相関係数**(sample canonical correlation coefficient)という．**標本正準ベクトル**(sample canonical vector) $\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i,\hat{\boldsymbol{\beta}}_j$ は

$$\boldsymbol{S}_{12}\boldsymbol{S}_{22}^{-1}\boldsymbol{S}_{21}\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i=r_i^2\boldsymbol{S}_{11}\hat{\boldsymbol{\alpha}}_i,\ \ \hat{\boldsymbol{\alpha}}_i^t\boldsymbol{S}_{11}\hat{\boldsymbol{\alpha}}_j=\delta_{ij}$$
$$\boldsymbol{S}_{21}\boldsymbol{S}_{11}^{-1}\boldsymbol{S}_{12}\hat{\boldsymbol{\beta}}_j=r_j^2\boldsymbol{S}_{22}\hat{\boldsymbol{\beta}}_j,\ \ \hat{\boldsymbol{\beta}}_i^t\boldsymbol{S}_{22}\hat{\boldsymbol{\beta}}_j=\delta_{ij}$$

の解である．

$(\boldsymbol{x}^t,\boldsymbol{y}^t)^t$ に正規性を仮定する．$r_1^2,\cdots,r_p^2$ の同時確率密度関数はゾーナル多項式†を含む無限級数で表わされる(A.G.Constantine[1963])．$N\to\infty$ のときの漸近分布は母正準相関係数の重複度に依存する．$\rho_1>\cdots>\rho_k>\rho_{k+1}=\cdots=\rho_p=0$ のとき

$$y_i=\sqrt{n}(r_i^2-\rho_i^2)/[2\rho_i(1-\rho_i^2)],\quad 1\leqq i\leqq k$$
$$y_i=nr_i^2,\quad k+1\leqq i\leqq p$$

の漸近分布は次のようになる．$y_1,\cdots,y_k,\{y_{k+1},\cdots,y_p\}$ は漸近的に独立であって，$y_i(i=1,\cdots,k)$ はN(0,1) に従う．また，$\{y_{k+1},\cdots,y_p\}$ の漸近分布の確率密度関数は

$$\pi^{(p-k)^2/2}[2^{(p-k)(q-k)/2}\Gamma_{p-k}((q-k)/2)$$
$$\times\Gamma_{p-k}((p-k)/2)]^{-1}\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{j=k+1}^{p}y_j\right\}$$
$$\times\prod_{j=k+1}^{p}x_j{}^{(q-p-1)/2}\prod_{k+1\leqq i<j}^{p}(y_i-y_j)$$

である．これらの漸近分布の精密化である漸近展開も求められている(N.Sugiura[1976], Y. Fujikoshi[1977])．$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ とのゼロでない母正準相関係数の個数を正準変量の**次元数**(dimensionality)という．次元数を決定する方法に，帰無仮説

$$H_k:\rho_{k+1}=\cdots=\rho_p=0$$

を対立仮説

$$K_k:H_k\text{ でない}$$

に対して検定する仮説検定を逐次に行う方法がある．$H_0,\cdots,H_{k-1}$ が棄却され，H_k が採択されたとき，次元数は k であるとする．仮説 H_0 は $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ との独立性に関する仮説で，尤度比基準 λ_0 は

$$\lambda_0^{2/N}=\Lambda_0=|\boldsymbol{S}|/(|\boldsymbol{S}_{11}||\boldsymbol{S}_{22}|)$$
$$=(1-r_1^2)\cdots(1-r_p^2)$$

である．検定は

$$T_0=-\{n-(1/2)(p+q+1)\}\log\Lambda_0$$

が仮説 H_0 のもとで漸近的に自由度 pq のカイ2乗分布に従うことを用いて行える．仮説H_k に対する尤度比基準 λ_k は

$$\lambda_k^{2/N}=\Lambda_k=(1-r_{k+1}^2)\cdots(1-r_p^2)$$

である．仮説 H_k のもとで

$$T_k=-\{n-(1/2)(p+q+1)\}\log\Lambda_k$$

は漸近的に自由度$(p-k)(q-k)$のカイ2乗分布に従う．カイ2乗分布へのよりよい近似として

$$\tilde{T}_k=-\left\{n-k-\frac{1}{2}(p+q+1)+\sum_{i=1}^{k}r_i^{-2}\right\}\log\Lambda_k$$

が提案されている(D.N.Lawley [1959])．変量が追加されたときの有意性検定を行うことができる．このため，$\boldsymbol{x}_u=(x_1,\cdots,x_k)^t$ に対して，$\boldsymbol{x}_v=(x_{k+1},\cdots,x_p)^t$ が追加されたとする．$\boldsymbol{x}_u$ と $\boldsymbol{y}$ との間の正準相関係数を$\rho_1^*\geqq\cdots\geqq\rho_k^*$とすれば

$$\rho_i\geqq\rho_i^*,\quad i=1,\cdots,p$$

が成り立つ．ここに，$\rho_{k+1}^*=\cdots=\rho_p^*=0$. $\boldsymbol{x}_v$ の有意性検定とは仮説 $\rho_i=\rho_i^*,\ i=1,\cdots,p$ の検定である．この仮説は$\boldsymbol{x}_u$を与えたときの$\boldsymbol{x}_v$と $\boldsymbol{y}$ との独立性の仮説に等しい．$(\boldsymbol{x}_v^t,\boldsymbol{y}^t)^t$ の$\boldsymbol{x}_u$への線形回帰を考えたときの標本残差分散共分散行列を

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{S}_{vv\cdot u} & \boldsymbol{S}_{vy\cdot u}\\ \boldsymbol{S}_{yv\cdot u} & \boldsymbol{S}_{yy\cdot u}\end{bmatrix}$$

とするとき，尤度比基準 λ は

$$\lambda^{2/N}=\Lambda=\begin{vmatrix}\boldsymbol{S}_{vv\cdot u} & \boldsymbol{S}_{vy\cdot u}\\ \boldsymbol{S}_{yv\cdot u} & \boldsymbol{S}_{yy\cdot u}\end{vmatrix}\Big/\{|\boldsymbol{S}_{vv\cdot u}||\boldsymbol{S}_{yy\cdot u}|\}$$

と表わされる．$-\{n-k-(p-k+q+1)/2\}\log\Lambda$ は仮説のもとで漸近的に自由度$(p-k)q$ のカイ2乗分布に従う．

ξ と η の間の相関係数

$$\boldsymbol{\alpha}^t\boldsymbol{S}_{xy}\boldsymbol{\beta}/(\boldsymbol{\alpha}^t\boldsymbol{S}_{xx}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\beta}^t\boldsymbol{S}_{yy}\boldsymbol{\beta})^{1/2}$$

を $\boldsymbol{\alpha}$ および $\boldsymbol{\beta}$ について最大化することにより，連続変量の場合と同様に正準相関係数が定義できる．しかしながら，この場合には $\boldsymbol{S}_{xx}$ および $\boldsymbol{S}_{yy}$ が正則ではないために固有方程式をそのままの形で解くことができない．これは単に技術的な問題であり，次のようにして避けることができる．1つの方法は x_p および y_q をデータから落とし，観測値行列$\boldsymbol{X}$から第 p 列および第 $p+q$ 列を除いた行列 $\tilde{\boldsymbol{X}}$ にもとづいて正準相関分析を適用することである．このとき，第k正準相関係数を ρ_k，第 k 正準ベクトルをそれぞれ $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}_k=(\alpha_{k1},\cdots,\alpha_{k,p-1})^t$, $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k=(\beta_{k1},\cdots,\beta_{k,q-1})^t$ とおくとき，x_p および y_q に与えられる重みはそれぞれ

$$\alpha_{k,p}=-(\alpha_{k1}+\cdots+\alpha_{k,p-1})$$
$$\beta_{k,q}=-(\beta_{k1}+\cdots+\beta_{k,q-1})$$

とおけばよい．ここであらためて $\boldsymbol{\alpha}_k=(\alpha_{k1},\cdots,\alpha_{kp})^t,\boldsymbol{\beta}_k=(\beta_{k1},\cdots,\beta_{kq})^t$ とおくと，$\boldsymbol{\alpha}_k^t\boldsymbol{1}_p=0,\boldsymbol{\beta}_i^t\boldsymbol{1}_q$

$=0$ の形に基準化されることになる．$\boldsymbol{S}_{xx}\boldsymbol{1}_p=\boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{S}_{yy}\boldsymbol{1}_q=0$ であることからこの基準化は自然な基準化である．2つめの方法は，固有方程式 $|\boldsymbol{N}\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{N}^t-r^2\boldsymbol{F}|=0$ の解を $r_1^2,\cdots,r_p^2$ $(r_1\geqq\cdots\geqq r_p\geqq 0)$ とし，各 r_k^2 に対して，$\boldsymbol{a}_k,\boldsymbol{b}_k$ を

$$\boldsymbol{N}\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{N}^t\boldsymbol{a}_k=r_k^2\boldsymbol{F}\boldsymbol{a}_k,\quad \boldsymbol{a}_k^t\boldsymbol{F}\boldsymbol{a}_k=n,$$
$$\boldsymbol{N}^t\boldsymbol{F}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{b}_k=r_k^2\boldsymbol{G}\boldsymbol{b}_k,\quad \boldsymbol{b}_k^t\boldsymbol{G}\boldsymbol{b}_k=n$$

の解とする．このとき

$$\rho_k=r_{k+1},\quad \boldsymbol{\alpha}_k=\boldsymbol{a}_{k+1},\quad \boldsymbol{\beta}_k=\boldsymbol{b}_{k+1}$$

が成り立つことを示すことができる．最大固有値は常に1であり，対応する固有ベクトルは $\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{1}_p$, $\boldsymbol{b}_1=\boldsymbol{1}_q$ となって，$\boldsymbol{S}_{xx},\boldsymbol{S}_{yy}$ の零化ベクトル†となり不適である．第2固有値に対応する固有値問題の解が第1正準ベクトルになる．

行列 $\boldsymbol{N}=(n_{ij})$ の代りに行列 $\boldsymbol{E}=(e_{ij})$ が与えられ，i,j は便宜上それぞれ個体，カテゴリーを表わす．行列 $\boldsymbol{E}$ に対して $e_{ij}\geqq 0$ を仮定する．e_{ij} を度数であるかのようにみなして，分割表データ $\boldsymbol{N}$ の場合と同様な正準相関係数，正準変量が与えられる．この場合の正準相関分析は**カテゴリカル正準相関分析**(categorical canonical correlation analysis)と呼ばれる．特に，$e_{ij}=1$（個体 i がカテゴリー j に反応するとき），$=0$（そうでないとき）と定義される場合は，数量化理論第3類(→Ⅲ.4.2)に相当している．

12.6 多変量分散分析

多変量回帰モデルは，互いに相関のあるいくつかの目的変量を少数の説明変量で説明することを目的として用いる．目的変量ベクトルを $\boldsymbol{y}=(y_1,\cdots,y_p)^t$ とし，説明変量ベクトルを $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_k)^t$ とし，これらの変量の N 個の個体についての観測値をそれぞれ

$$\boldsymbol{Y}=[\boldsymbol{y}_1,\cdots,\boldsymbol{y}_N]^t,\quad \boldsymbol{X}=[\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N]^t$$

と表わす．確率行列 $\boldsymbol{Y}$ のモデルとして

$$\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{\Xi}+\boldsymbol{U}$$

を仮定する．ここに，$\boldsymbol{\Xi}:k\times p$ は未知の母数行列，$\boldsymbol{X}:N\times k$ は既知の説明変量行列，$\boldsymbol{U}:N\times p$ は誤差行列である．$\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\cdots,\boldsymbol{u}_N]^t$ について，$\boldsymbol{u}_1,\cdots,\boldsymbol{u}_N$ は互いに独立に平均 $\boldsymbol{0}$, 分散共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ をもつ同一の分布に従うことを仮定する．このモデルを**多変量回帰モデル**(multivariate regression model)，または**多変量線形モデル**(multivariate linear model)という．$\boldsymbol{\Xi}$ を**回帰行列**(regression matrix)という．種々の計画にもとづく実験において，各個体についていくつかの変量が観測される場合，$\boldsymbol{x}$ の各成分が 0,1 をとる分類変量のことも多い．このようなとき特に**多変量分散分析モデル**(multivariate analysis of variance model; **MANOVA モデル**)と呼ばれる．そのとき $\boldsymbol{X}$ は**計画行列**(design matrix)と呼ばれることが多い．$\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X}$ は一般に正則でないが，母数行列 $\boldsymbol{\Xi}$ に制約条件がおかれるので，独立な母数行列に関する多変量回帰モデルに書き直すと，この新しいモデルでの $\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X}$ を正則にできる．

多変量線形モデルにおける行列 $\boldsymbol{Y},\boldsymbol{U},\boldsymbol{\Xi}$ の各 i 列をそれぞれ縦につなげてベクトル化(Ⅷ.2.5.2)

$$\boldsymbol{y}=\mathrm{vec}(\boldsymbol{Y}),\quad \boldsymbol{u}=\mathrm{vec}(\boldsymbol{U}),\quad \boldsymbol{\xi}=\mathrm{vec}(\boldsymbol{\Xi})$$

すれば，モデルは

$$\boldsymbol{y}=(\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{X})\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{u}$$

となり

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{u})=\boldsymbol{0},\quad \mathrm{V}(\boldsymbol{u})=\boldsymbol{\Sigma}\otimes\boldsymbol{I}_N$$

である．ここに，$\otimes$ は行列のクロネッカー積を表わす．したがって，多変量線形モデルは，1変量の場合の一般化線形モデル†で，説明変量行列と分散共分散行列がある種の構造をもつ場合とみなすこともできる．$\boldsymbol{\Xi}$ の**最小2乗推定量**(least squares estimator)，すなわち

$$(\boldsymbol{y}-(\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{X})\boldsymbol{\xi})^t(\boldsymbol{y}-(\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{X})\boldsymbol{\xi})$$
$$=\mathrm{tr}(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\Xi})^t(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\Xi})$$

を最小にする推定量 $\boldsymbol{\xi}$，すなわち $\boldsymbol{\Xi}$ は $\mathrm{rank}(\boldsymbol{X})=k$ のもとで

$$\hat{\boldsymbol{\Xi}}=(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{Y}$$

で与えられる．$\boldsymbol{\Xi}$ の線形関数 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Xi}$, $\boldsymbol{a}^t\boldsymbol{\Xi}\boldsymbol{b}$ ($\boldsymbol{C}$: $q\times k$ は定数行列，$\boldsymbol{a}:p\times 1$, $\boldsymbol{b}:k\times 1$ は定数ベクトル)の最良線形不偏推定量†は，それぞれ，$\boldsymbol{C}\hat{\boldsymbol{\Xi}}$, $\boldsymbol{a}^t\hat{\boldsymbol{\Xi}}\boldsymbol{b}$ で与えられる．この結果は**多変量ガウス＝マルコフ定理**(multivariate Gauss-Markov theorem)と呼ばれる．

$$\boldsymbol{S}_e=(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\Xi}})^t(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\Xi}})$$
$$=\boldsymbol{Y}^t(\boldsymbol{I}_N-\boldsymbol{P}_X)\boldsymbol{Y},\quad \boldsymbol{P}_X=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t$$

を**誤差変動行列**(variation matrix due to error)，または，**残差平方和積和行列**(residual sum of squares and products matrix)という．$n=N-k$ とおくとき，$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=(1/n)\boldsymbol{S}_e$ は $\boldsymbol{\Sigma}$ の不偏推定量である．$\boldsymbol{U}$ の各行が p 変量正規分布に従うことを仮定すると，$(\hat{\boldsymbol{\Xi}},\hat{\boldsymbol{\Sigma}})$ は完備†な十分統計量†であるから，$\hat{\boldsymbol{\Xi}},\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ は一様最小分散不偏推定量†になる．また $\hat{\boldsymbol{\Xi}}$ と $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ は互いに独立で，$\hat{\boldsymbol{\xi}}=\mathrm{vec}(\hat{\boldsymbol{\Xi}})$ は kp 変量正規分布

$$\mathrm{N}(\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\Sigma}\otimes(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1})$$

に従い，$n\hat{\boldsymbol{\Sigma}}=\boldsymbol{S}_e$ はウィシャート分布 $\mathrm{W}(n,\boldsymbol{\Sigma})$ に従う．

行列 $\boldsymbol{C}:q\times k$ を階数 k の既知行列とし，仮説 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{\Xi}=\boldsymbol{O}$ の検定を考える．仮説のもとでの $\boldsymbol{\Xi}$ の