2 次元の場合について考える．今，X は

$$X = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} \\ \vdots & \vdots \\ x_{N,1} & x_{N,2} \end{pmatrix}$$

であるとする．また，X は中心化されていると仮定する．すなわち

$$\bar{x_k} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{i,k} = 0 \quad (k = 1, 2)$$

であるとする．

X^TX の 2 次形式を最大にする単位ベクトル $u \in \mathbb{R}^2$ を考えたい．これはラグランジュの未定乗数法より，ある実数 λ' が存在して

$$F(u, \lambda) := u^TX^TXu - \lambda(1 - \|u\|_2^2)$$

に対して

$$\frac{\partial F}{\partial u}(u, \lambda') = \frac{\partial F}{\partial \lambda}(u, \lambda') = 0$$

を満たしている．ここで，$\dfrac{\partial F}{\partial u}(u, \lambda) = 0$ であることより

$$\begin{aligned} &2X^TXu - 2\lambda' u = 0 \\ &\therefore X^TXu = \lambda' u \end{aligned}$$

が成立している．したがって求める u は存在すれば X^TX の固有値となることがわかる．また，上式の両辺に u^T をかけることで

$$u^TX^XXu = u^T\lambda u = \lambda\|u\|_2^2 = \lambda$$

となることがわかる．上式より X^TX の 2 次形式の最大値は X^TX の最大固有値であることがわかる．

また

$$u^TX^TXu = \sum_{i=1}^{N}(x_{i,1}u_1 + x_{i,2}u_2)^2$$

であることより，上式の左辺は X の各行ベクトルを u に射影したものの分散に一致することがわかる．したがって X^TX の最大固有値は，Xu の分散が最大になるように u をとったときの 2 次形式 u^TX^TXu に等しいことが言える．

図でのイメージは以下のようになる