エルミート多項式

直交多項式であるエルミート多項式を求めます。ロドリゲスの公式から導出し、基本的な関係を求めています。その後に、グラム・シュミットの正規直交化法、一般化されたロドリゲスの公式による導出を示しています。

エルミート多項式 (Hermite polynomials) を作るだけなら簡単です。e^{-x^2} の微分は

$$\frac{d}{dx}e^{-x^2} = -2xe^{-x^2}\ ,\ \frac{d^2}{dx^2}e^{-x^2} = (-2+4x^2)e^{-x^2}\ ,\ \frac{d^3}{dx^3}e^{-x^2} = (12x-8x^3)e^{-x^2}, \ldots$$

となっていて、e^{x^2} がなければ多項式になります。そして、x のべき乗の最大は

$$\begin{aligned}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} = \frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}(-2x)e^{-x^2} &= \frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}(-2x)^2e^{-x^2} - 2\frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}e^{-x^2}\\ &= \frac{d^{n-3}}{dx^{n-3}}(-2x)^3e^{-x^2} + e^{-x^2}\frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}(-2x)^2 - 2\frac{d^{n-2}}{dx^{n-2}}e^{-x^2}\\ &= (-2x)^ne^{-x^2} + \cdots\end{aligned}$$

として出てくるので、微分に $(-1)^ne^{x^2}$ をくっつけて

$$H_{(n)}(x) = (-1)^ne^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} \tag{1}$$

としたものがエルミート多項式です。これはエルミート多項式のロドリゲスの公式と呼ばれます。$n=4$ まで求めると

$$\begin{aligned}&H_{(1)} = (-1)e^{x^2}\frac{d}{dx}e^{-x^2} = 2x\\ &H_{(2)} = (-1)^2e^{x^2}\frac{d^2}{dx^2}e^{-x^2} = \frac{d}{dx}(-2xe^{-x^2}) = -2+4x^2\\ &H_{(3)} = (-1)^3e^{x^2}\frac{d^3}{dx^3}e^{-x^2} = -\frac{d}{dx}(-2+4x^2)e^{-x^2} = -(8x+4x-8x^3) = -12x+8x^3\\ &H_{(4)} = (-1)^4e^{x^2}\frac{d^4}{dx^4}e^{-x^2} = \frac{d}{dx}(12x-8x^3)e^{-x^2} = (12-24x^2-24x^2+16x^4) = 12-48x^2+16x^4\end{aligned}$$

となっています。$H_{(n)}$ の n は n 次多項式であることを表します。

$H_{(n)}$ が直交していることを示します。そのために

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\frac{d^me^{-x^2}}{dx^m}H_{(n)}(x) \tag{2}$$

としてみると、例えば $m=2, n=1$ では

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d^2 e^{-x^2}}{dx^2} H_{(1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx}(\frac{d}{dx}e^{-x^2}) H_{(1)} \\
&= \big[-2xe^{-x^2}H_{(1)}\big]_{-\infty}^{\infty} + (-1)\int_{-\infty}^{\infty} dx(\frac{d}{dx}e^{-x^2})\frac{dH_{(1)}}{dx} \\
&= (-1)\int_{-\infty}^{\infty} dx(\frac{d}{dx}e^{-x^2})\frac{dH_{(1)}}{dx} \\
&= -\big[e^{-x^2}\frac{dH_{(1)}}{dx}\big]_{-\infty}^{\infty} + (-1)^2\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2}\frac{d^2H_{(1)}}{dx^2} \\
&= (-1)^2\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2}\frac{d^2H_{(1)}}{dx^2} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

$H_{(1)}$ は x の 1 次までの多項式なので 2 回微分すれば 0 です。このように、n 次多項式 $H_{(n)}$ の m 回微分が出てくるために、$m > n$ では 0 になります。$m = n$ では

$$
\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n} H_{(n)} = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2}\frac{d^n}{dx^n}H_{(n)} = A_n \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = A_n\sqrt{\pi}
$$

$H_{(n)}$ は x^n までの多項式なので n 回微分すれば定数になり、それと $(-1)^n$ を合わせて A_n としています。$H_{(n)}$ は係数を c_k として

$$
H_{(n)} = c_0 + c_1x + c_2x^2 + \cdots + 2^n x^n
$$

となっているので、n 回微分すれば

$$
\frac{d^n H_{(n)}}{dx^n} = 2^n n!
$$

これから

$$
A_n = (-1)^n \frac{d^n H_{(n)}}{dx^n} = (-2)^n n!
$$

と求まるので

$$
\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n} H_{(n)} = (-1)^n 2^n n! \sqrt{\pi}
$$

このように、(2) は $m > n$ では 0、$m = n$ では値を持ちます。

今見てきた積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx H_{(m)} H_{(n)} e^{-x^2} = (-1)^m \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d^m e^{-x^2}}{dx^m} H_{(n)}$$

として出てきて、どちらも同じエルミート多項式なので $m > n$ は $m \neq n$ とできます。よって、エルミート多項式の直交関係はクロネッカーデルタ δ_{mn} を使って

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx H_{(m)} H_{(n)} e^{-x^2} = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}$$

e^{-x^2} は (2) にするために付けていて、今の内積におけるウェイト関数です。この内積のもとでエルミート多項式の直交性は与えられています。

エルミート多項式のべき乗は偶数か奇数かで出てきます。これは簡単に分かります。x の符号を反転させると

$$H_{(n)}(-x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{1}{(-1)^n} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = (-1)^n H_{(n)}(x)$$

なので、$H_{(n)}$ が x^{2n} $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ までなら

$$H_{(2n)}(x) = c_{2n} x^{2n} + c_{2n-2} x^{2n-2} + \cdots + c_2 x^2 + c_0 \quad (H_{(2n)}(x) = H_{(2n)}(-x))$$

となる必要があり、x^{2n+1} までなら

$$H_{(2n+1)}(x) = c_{2n+1} x^{2n+1} + c_{2n+1} x^{2n-1} + \cdots + c_3 x^3 + c_1 x \quad (H_{(2n+1)}(x) = -H_{(2n+1)}(-x))$$

となり、偶数だけか奇数だけの多項式になることが分かります。

エルミート多項式は積分から与えることもできます。e^{-x^2} の微分から作られているので、フーリエ変換を使って

$$I(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{-t^2} e^{2ixt}$$

とします。x で微分すると

$$\begin{aligned}
\frac{dI}{dx} = 2i \int_{-\infty}^{\infty} dt\ t e^{-t^2} e^{2ixt} &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt (\frac{d}{dt} e^{-t^2}) e^{2ixt} \\
&= -i \big[e^{-t^2} e^{2ixt} \big]_{-\infty}^{\infty} - 2x \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-t^2} e^{2ixt} \\
&= -2x \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-t^2} e^{2ixt} \\
&= -2xI
\end{aligned}$$

これの解は

$$I = Ce^{-x^2}$$

C は定数です。よって

$$\frac{1}{C}\int_{-\infty}^{\infty} dte^{-t^2}e^{2ixt} = e^{-x^2}$$

$t = 0$ のとき、ガウス積分から

$$\int_{-\infty}^{\infty} dxe^{-x^2} = \sqrt{\pi}$$

なので、C は

$$1 = \frac{1}{C}\int_{-\infty}^{\infty} dxe^{-x^2} = \frac{1}{C}\sqrt{\pi} \ \Rightarrow \ C = \sqrt{\pi}$$

よって

$$e^{-x^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dte^{-t^2}e^{2ixt}$$

として、e^{-x^2} を積分で表せます。
　これを微分していくと

$$\frac{d}{dx}e^{-x^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(2i)\int_{-\infty}^{\infty} dt\ te^{-t^2}e^{2ixt}$$
$$\frac{d^2}{dx^2}e^{-x^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(2i)^2\int_{-\infty}^{\infty} dt\ t^2e^{-t^2}e^{2itx}$$

なので

$$\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(2i)^n\int_{-\infty}^{\infty} dt\ t^ne^{-t^2}e^{2ixt}$$

よって

$$H_{(n)}(x) = (-1)^ne^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}}(2i)^ne^{x^2}\int_{-\infty}^{\infty} dt\ t^ne^{-t^2}e^{2ixt}$$

となり、積分を使った形になります。

直交多項式には母関数 (generating function) と呼ばれるものがあります。これは、直交多項式を $F_{(n)}$ として

$$G(x,r)=\sum_{n=0}^{\infty}g_nr^nF_{(n)}(x)=g_0F_{(0)}(x)+g_1rF_{(1)}(x)+g_2r^2F_{(2)}(x)+\cdots$$

と定義されます。つまり、r で m 回微分して $r=0$ にすれば $F_{(m)}$ が取り出せる関数です。エルミート多項式では、積分形を使うと

$$\sum_{n=0}^{\infty}g_nr^nH_{(n)}(x)=\frac{e^{x^2}}{\sqrt{\pi}}\sum_{n=0}^{\infty}(-2i)^ng_nr^n\int_{-\infty}^{\infty}dt\ t^ne^{-t^2}e^{2ixt}$$

$g_n=1/n!$ とすると

$$\begin{aligned}\frac{e^{x^2}}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dt\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-2irt)^n}{n!}e^{-t^2}e^{2ixt}&=\frac{e^{x^2}}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dte^{-2irt}e^{-t^2}e^{2ixt}\\&=\frac{e^{x^2}}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dte^{-t^2}e^{2i(x-r)t}\\&=e^{x^2}e^{-(x-r)^2}\\&=e^{2xr-r^2}\end{aligned}$$

これから、エルミート多項式の母関数は

$$G(x,r)=e^{2xr-r^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{(n)}(x)}{n!}r^n \tag{3}$$

と与えられます。

指数関数を展開すると

$$\begin{aligned}e^{2xr-r^2}=e^{2xr}e^{-r^2}=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(2xr)^m}{m!}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-r^2)^k}{k!}&=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{(2x)^m}{m!k!}r^{m+2k}\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{[n/2]}(-1)^k\frac{(2x)^{n-2k}}{(n-2k)!k!}r^n\qquad(n=m+2k)\end{aligned}$$

級数の積の関係を使っています。k の範囲は $m=n-2k\geq 0$ から、n が偶数なら 0 から $n/2$ まで、奇数なら 0 から $(n-1)/2$ です。それらをまとめて $[n/2]$ と表記しています。(3) での r^n の項を比較すれば

$$H_{(n)}(x)=\sum_{k=0}^{[n/2]}(-1)^k\frac{n!}{(n-2k)!k!}(2x)^{n-2k}=\sum_{k=0}^{[n/2]}(-1)^k\frac{n(n-1)\cdots(n-2k+1)}{k!}(2x)^{n-2k}$$

となり、エルミート多項式の和による形が求まります。ちなみに、これから

$$(-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} = \sum_{k=0}^{[n/2]}(-1)^k\frac{n!}{(n-2k)!k!}(2x)^{n-2k}$$

$$\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} = e^{-x^2}\sum_{k=0}^{[n/2]}(-1)^{n+k}\frac{n!}{(n-2k)!k!}(2x)^{n-2k}$$

として、e^{-x^2} の微分が分かります。

母関数からエルミート多項式が従う漸化式と微分方程式を求められます。母関数を r で偏微分すると

$$\frac{\partial G}{\partial r} = (2x-2r)e^{2xr-r^2} = (2x-2r)G$$

これに

$$\frac{\partial G}{\partial r} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{(n)}(x)}{n!}nr^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{H_{(n)}(x)}{(n-1)!}r^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{(n+1)}(x)}{n!}r^n$$

$$2xG = 2x\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{(n)}(x)}{n!}r^n$$

$$2rG = 2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_{(n)}(x)}{n!}r^{n+1} = 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{H_{(n-1)}(x)}{(n-1)!}r^n = 2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{nH_{(n-1)}(x)}{n(n-1)!}r^n = 2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{nH_{(n-1)}(x)}{n!}r^n$$

を入れれば

$$H_{(n+1)}(x) = 2xH_{(n)}(x) - 2nH_{(n-1)}(x) \quad (n=1,2,\ldots) \tag{4}$$

として、漸化式が求まります。x の偏微分からも漸化式が求まります。このときは

$$\frac{\partial G}{\partial x} = 2rG \tag{5}$$

なので、H は x しか変数に持たないので常微分に変えて

$$\frac{dH_{(n)}}{dx} = 2nH_{(n-1)} \quad (n=1,2,\ldots)$$

この漸化式は $H_{(n)}$ の微分と $H_{(n-1)}$ の関係を与えているので、便利な関係になっています。

(5) を (4) に入れて、x で微分すると

$$
\begin{aligned}
H_{(n+1)} &= 2xH_{(n)} - \frac{dH_{(n)}}{dx} \\
\frac{dH_{(n+1)}}{dx} &= 2H_{(n)} + 2x\frac{dH_{(n)}}{dx} - \frac{d^2H_{(n)}}{dx^2} \\
2(n+1)H_{(n)} &= 2H_{(n)} + 2x\frac{dH_{(n)}}{dx} - \frac{d^2H_{(n)}}{dx^2} \\
\frac{d^2H_{(n)}}{dx^2} - 2x\frac{dH_{(n)}}{dx} + 2nH_{(n)} &= 0
\end{aligned}
$$

この形の微分方程式をエルミート方程式と言い、エルミート多項式はエルミート方程式の解になっているのが分かります。ただし、$n = 0, 1, 2, \ldots$ であることに注意してください。

まとめると

- ロドリゲスの公式

$$H_{(n)}(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

- 積分形

$$H_{(n)}(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{\pi}}(2i)^n e^{x^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt\ t^n e^{-t^2} e^{2ixt}$$

- 和による形

$$H_{(n)}(x) = \sum_{k=0}^{[n/2]} (-1)^k \frac{n!}{(n-2k)!k!}(2x)^{n-2k}$$

- 直交関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx H_{(m)} H_{(n)} e^{-x^2} = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn}$$

- $H_{(n)}(x) = (-1)^n H_{(n)}(-x)$

- 母関数

$$G(x, r) = e^{2xr - r^2}$$

- 漸化式 $(n = 1, 2, \ldots)$

$$
\begin{aligned}
H_{(n+1)} &= 2xH_{(n)} - 2nH_{(n-1)} \\
\frac{dH_{(n)}}{dx} &= 2nH_{(n-1)}
\end{aligned}
$$

- 微分方程式 (エルミート方程式)

$$\frac{d^2H_{(n)}}{dx^2}-2x\frac{dH_{(n)}}{dx}+2nH_{(n)}=0$$

エルミート多項式で関数を近似する例を 1 つ示します。ここでの近似は関数 f をエルミート多項式によって

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nH_{(n)}(x)$$

と展開することです。このとき求めたいのは係数 a_n です。例えば、$f(x)=e^{\alpha x}$ (α は定数) とすれば、直交関係から

$$\begin{aligned}
e^{\alpha x} &= \sum_{n=0}^{\infty}a_nH_{(n)}(x)\\
H_{(m)}e^{\alpha x} &= \sum_{n=0}^{\infty}a_nH_{(m)}H_{(n)}\\
\int_{-\infty}^{\infty}dxH_{(m)}e^{\alpha x}e^{-x^2} &= \sum_{n=0}^{\infty}a_n\int_{-\infty}^{\infty}dxH_{(m)}H_{(n)}e^{-x^2}\\
&= 2^m m!\sqrt{\pi}a_m\\
a_m &= \frac{1}{2^m m!\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dxH_{(m)}e^{-x^2}e^{\alpha x}
\end{aligned}$$

積分は

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}dxH_{(m)}e^{-x^2}e^{\alpha x} = (-1)^m\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{\alpha x}\frac{d^m}{dx^m}e^{-x^2} &= (-1)^m\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{\alpha x}\frac{d}{dx}\frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}}e^{-x^2}\\
&= (-1)^m\big[e^{\alpha x}\frac{d^{m-1}e^{-x^2}}{dx^{m-1}}\big]_{-\infty}^{\infty}-(-1)^m\int_{-\infty}^{\infty}dx\frac{de^{\alpha x}}{dx}\frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}}e^{-x^2}\\
&= (-1)^{m+1}\alpha\int_{-\infty}^{\infty}dx\ e^{\alpha x}\frac{d^{m-1}}{dx^{m-1}}e^{-x^2}
\end{aligned}$$

2 行目の第 1 項では e^{-x^2} が常に出てくるため、無限大で 0 です。同じことをすれば

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{\alpha x}\frac{d^m}{dx^m}e^{-x^2} &= (-1)^{m+1}\alpha\Big(\big[e^{\alpha x}\frac{d^{m-2}e^{-x^2}}{dx^{m-2}}\big]_{-\infty}^{\infty}+(-1)^{m+2}\int_{-\infty}^{\infty}dx\ e^{\alpha x}\frac{d^{m-2}}{dx^{m-2}}e^{-x^2}\Big)\\
&= (-1)^{m+2}\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}dx\ e^{\alpha x}\frac{d^{m-2}}{dx^{m-2}}e^{-x^2}
\end{aligned}$$

と続いていくので、m 回繰り返せば

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\alpha x}\frac{d^m}{dx^m}e^{-x^2} &= (-1)^{2m}\alpha^m\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{\alpha x - x^2} \\
&= \alpha^m\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \exp[-(x-\frac{1}{2}\alpha)^2+\frac{1}{4}\alpha^2] \\
&= \alpha^m e^{\alpha^2/4}\int_{-\infty}^{\infty} dx'\ e^{-x'^2} \qquad (x' = x - \frac{1}{2}\alpha) \\
&= \alpha^m\sqrt{\pi}e^{\alpha^2/4}
\end{aligned}
$$

よって

$$
a_m = \frac{\alpha^m}{2^m m!}e^{\alpha^2/4}
$$

と求まり、エルミート多項式による展開は

$$
e^{\alpha x} = e^{\alpha^2/4}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{2^n n!}H_{(n)}(x)
$$

となります。

ここから、グラム・シュミットの正規直交化法と一般化されたロドリゲスの公式からエルミート多項式を求めます。別の方法から同じ結果を求めるだけです。また、「エルミート方程式」ではエルミート方程式の級数解として求めています。

- グラム・シュミットの正規直交化法

  $L_n(x) = x^n$ として、すでに分かっているので内積を

$$
\int_{-\infty}^{\infty} dx\ L_m L_n e^{-x^2}
$$

と与えます。ガウス積分は $n = 0, 1, 2, \ldots$ として

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-x^2}dx &= \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi} \qquad (n!! = n(n-2)(n-4)\cdots) \\
\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n+1}e^{-x^2}dx &= 0
\end{aligned}
$$

なので、L_0, L_1 では

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} dx\ L_0 L_0 e^{-x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}\ ,\ \int_{-\infty}^{\infty} dx\ L_1 L_1 e^{-x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 e^{-x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
&\int_{-\infty}^{\infty} dx\ L_0 L_1 e^{-x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x e^{-x^2} = 0
\end{aligned}
$$

L_0, L_1 を 1 に規格化したのを

$$P_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} \ , \ P_1 = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} x$$

とすれば、P_2 はグラム・シュミットの正規直交化法から

$$\begin{aligned}
P_2(x) &= L_2 - P_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx P_0 L_2 e^{-x^2} - P_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx P_1 L_2 e^{-x^2} \\
&= x^2 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x^2 e^{-x^2} - \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x^3 e^{-x^2} \\
&= x^2 - \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

P_0, P_1 とは

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P_0 P_2 e^{-x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x^2 - \frac{1}{2}) e^{-x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P_1 P_2 e^{-x^2} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} dx (x^3 - \frac{1}{2} x) e^{-x^2} = 0$$

となるので、直交しています (1 に規格化はしていない)。P_3 も求めてみると

$$\begin{aligned}
P_3 &= L_3 - P_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx P_0 L_3 e^{-x^2} - P_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx P_1 L_3 e^{-x^2} - P_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx P_2 L_3 e^{-x^2} \\
&= x^3 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x^3 e^{-x^2} - \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x^4 e^{-x^2} - (x^2 - \frac{1}{2}) \int_{-\infty}^{\infty} dx (x^5 - \frac{1}{2} x^3) e^{-x^2} \\
&= x^3 - \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x^4 e^{-x^2} \\
&= x^3 - \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \frac{3}{4} \sqrt{\pi} \\
&= x^3 - \frac{3}{2} x
\end{aligned}$$

P_n の x^n の項の係数を 2^n とするために係数を変えると

$$H_0 = L_0 = 1 \ , \ H_1 = 2L_1 = 2x \ , \ H_2 = 2^2 P_2 = 4x^2 - 2 \ , \ H_3 = 2^3 P_3 = 8x^3 - 12x$$

となり、エルミート多項式になります。

- 一般化されたロドリゲスの公式
  「直交多項式」で求めている関係は説明なしで使っていきます。一般化されたロドリゲスの公式は

$$C_{(n)}(x)=\frac{1}{K_n}\frac{1}{w(x)}\frac{d^n}{dx^n}(w(x)s^n(x)) \quad (n=0,1,2,\ldots)$$

$C_{(n)}(x)$ は n 次多項式、$s(x)$ は 2 次以下の多項式、$w(x)$ は正の実数、K_n は規格化定数です。直交関係は

$$\int_a^b dx\ C_{(m)}C_{(n)}(x)w(x)=0 \quad (m\neq n)$$
$$\int_a^b dxC_{(n)}^2 w=(-1)^n\frac{c_n n!}{K_n}\int_a^b dx\ w(x)s^n(x)$$

c_n は $C_{(n)}$ の x^n の係数です。$s(x)$ を定数 α とします。そうすると

$$C_{(n)}(x)=\frac{1}{K_n}\frac{1}{w(x)}\frac{d^n}{dx^n}(w(x)s^n(x))=\frac{\alpha^n}{K_n}\frac{1}{w(x)}\frac{d^n}{dx^n}w(x)$$

$C_{(1)}$ は 1 次多項式なので

$$C_{(1)}=-\frac{1}{K_1}x$$

とすれば

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{K_1}x&=\frac{1}{K_1}\frac{1}{w(x)}\frac{d}{dx}(w(x)s(x))\\
-x&=\frac{1}{w}(\frac{dw}{dx}s+w\frac{ds}{dx})\\
\frac{1}{w}\frac{dw}{dx}&=-\frac{1}{s}(\frac{ds}{dx}+x)\\
&=-\frac{1}{\alpha}x\\
\log w&=-\frac{1}{\alpha}\int dx\ x\\
w&=A\exp[-\frac{1}{2\alpha}x^2]
\end{aligned}$$

定数 A は 1 にし、x を $\sqrt{2\alpha}x$ と置き換えれば

$$w(x)=e^{-x^2} \tag{6}$$

これから

$$C_{(n)}(x)=\frac{1}{K_n}\frac{1}{w(x)}\frac{d^n}{dx^n}(w(x)s^n(x))=\frac{1}{K_n}\frac{1}{w(x)}\frac{d^n}{dx^n}w(x)=\frac{1}{K_n}e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}$$

$K_n=(-1)^n$ とすれば (1) になるので、$C_{(n)}$ はエルミート多項式です。
　直交関係は、$sw(x)=\alpha w(x)$ は a,b で 0 になる必要があるので、$a=-\infty,b=\infty$ となり

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxC_{(m)}(x)C_{(n)}(x)e^{-x^2}=0\quad(m\neq n)$$

$$h_n=\int_{-\infty}^{\infty}dxC_{(n)}^2(x)e^{-x^2}=(-1)^n\frac{c_nn!}{K_n}\int_a^b dxw(x)s^n(x)$$

そうすると、(6) から

$$h_n=(-1)^n\frac{c_nn!}{K_n}\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-x^2}=(-1)^n\frac{c_nn!}{K_n}\sqrt{\pi}$$

$K_n=(-1)^n$ として

$$h_n=\sqrt{\pi}c_nn!=2^nn!\sqrt{\pi}\quad\left(c_nx^n=\frac{(-1)^n}{K_n}2^nx^n=2^nx^n\ \Rightarrow\ c_n=2^n\right)$$

というわけで

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxC_{(m)}(x)C_{(n)}(x)e^{-x^2}=2^nn!\sqrt{\pi}\delta_{nm}$$

として、エルミート多項式の直交関係になります。
　ここから $C_{(n)}$ はエルミート多項式 $H_{(n)}$ としていきます。
　$H_{(n)}$ が従う漸化式と微分方程式を求めます。一般化されたロドリゲスの公式から出てくる漸化式は

$$H_{(n+1)}=(A_nx+B_n)H_{(n)}+D_nH_{(n-1)}$$

$$A_n=\frac{c_{n+1}^{(n+1)}}{c_n^{(n)}}\ ,\ B_n=a_n=\frac{c_n^{(n+1)}}{c_n^{(n)}}-\frac{c_{n+1}^{(n+1)}c_{n-1}^{(n)}}{(c_n^{(n)})^2}\ ,\ D_n=a_{n-1}=-\frac{h_n}{h_{n-1}}\frac{c_{n+1}^{(n+1)}c_{n-1}^{(n-1)}}{(c_n^{(n)})^2}$$

$c_n^{(n)}$ は $H_{(n)}$ での x^n の係数です。エルミート多項式は

$$H_{(n)}(x)=2^nx^n+\cdots$$

として作っているので

$$c_n^{(n)} = 2^n \ , \ c_{n+1}^{(n+1)} = 2^{n+1} \ , \ c_{n-1}^{(n-1)} = 2^{n-1}$$

$H_{(n)}$ には偶数か奇数のべき乗しか現れないので、$c_n^{(n+1)}, c_{n-1}^{(n)} = 0$ です。これらから

$$A_n = 2 \ , \ B_n = 0 \ , \ D_n = -\frac{h_n}{h_{n-1}}\frac{2^{2n}}{2^{2n}} = -\frac{2^n n!\sqrt{\pi}}{2^{n-1}(n-1)!\sqrt{\pi}} = -2n$$

となり、漸化式は

$$H_{(n+1)} = 2xH_{(n)} - 2nH_{(n-1)} \tag{7}$$

と求まります。

微分方程式は

$$\frac{d}{dx}(ws\frac{dH_{(n)}}{dx}) = -w\lambda_n H_{(n)}$$

$$\lambda_n = -n(K\frac{dH_{(1)}}{dx} + \frac{1}{2}(n-1)\frac{d^2 s}{dx^2})$$

で与えられます。K は

$$KH_{(1)} = \frac{ds}{dx} + \frac{s}{w}\frac{dw}{dx}$$

としています。s は定数 α で、$w = e^{-x^2}$ なので

$$\frac{d}{dx}(ws\frac{dH_{(n)}}{dx}) = \alpha\frac{d}{dx}(e^{-x^2}\frac{dH_{(n)}}{dx}) = \alpha(-2xe^{-x^2}\frac{dH_{(n)}}{dx} + e^{-x^2}\frac{d^2 H_{(n)}}{dx^2})$$

$H_{(1)} = 2x$ から λ_n は

$$\lambda_n = -2nK = -2n(\frac{ds}{dx} + \frac{s}{w}\frac{dw}{dx})H_{(1)}^{-1} = -2\alpha n(-2x)\frac{1}{2x} = 2\alpha n$$

よって

$$\alpha(-2x\frac{dH_{(n)}}{dx} + \frac{d^2 H_{(n)}}{dx^2})e^{-x^2} = -2\alpha n H_{(n)} e^{-x^2}$$

$$\frac{d^2 H_{(n)}}{dx^2} - 2x\frac{dH_{(n)}}{dx} + 2nH_{(n)} = 0$$

として、エルミート方程式になります。また、微分を含む漸化式

$$2A_n s\frac{dH_{(n)}}{dx} = (-A_n\frac{1}{w}\frac{d(ws)}{dx} + (A_n x + B_n)(\lambda_n - \lambda_{n+1}))H_{(n)} + D_n(\lambda_{n-1} - \lambda_{n+1})H_{(n-1)}$$

からは

$$\begin{aligned}
4\alpha\frac{dH_{(n)}}{dx} &= (-2\alpha(-2x) + 4\alpha x(n-(n+1)))H_{(n)} - 4n((n-1)-(n+1))H_{(n-1)} \\
4\frac{dH_{(n)}}{dx} &= (4x-4x)H_{(n)} + 8nH_{(n-1)} \\
\frac{dH_{(n)}}{dx} &= 2nH_{(n-1)}
\end{aligned}$$

となります。