

Dodatek B

Wielomiany Hermite'a i ich własności

B.1 Definicje

Jako podstawową definicję wielomianów Hermite'a przyjmujemy wzór Rodriguesa

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad (\text{B.1})$$

który pozwala konstruktywnie obliczać kolejne wielomiany. I tak mamy

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, \\ H_1(x) &= 2x, \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Widać więc, że wielomiany Hermite'a stopnia parzystego $n = 2k$ zawierają tylko parzyste potęgi argumentu – są funkcjami parzystymi. Gdy zaś $n = 2k + 1$, to $H_n(x)$ są nieparzyste. Można inaczej definiować wielomiany Hermite'a, a potem inaczej wyprowadzać ich własności. Wybór definicji jest jednak sprawą "smaku matematycznego".

Zanim przejdziemy do dalszej dyskusji, zauważmy, że zachodzi następująca relacja

$$\frac{d^n}{dx^n} e^{-(s-x)^2} = (-1)^n \frac{d^n}{ds^n} e^{-(s-x)^2}, \quad (\text{B.3})$$

która wynika z zasad różniczkowania funkcji złożonej. Zresztą łatwo jest przeprowadzić dowód tej relacji metodą indukcji. Zastosujmy więc (B.3) do wzoru Rodriguesa

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-(s-x)^2} \Big|_{s=0} = e^{x^2} \frac{d^n}{ds^n} e^{-(s-x)^2} \Big|_{s=0} = \frac{d^n}{ds^n} e^{-s^2+2sx} \Big|_{s=0}. \quad (\text{B.4})$$

Przypomnijmy teraz, że funkcję zmiennej s można zapisać w postaci rozwinięcia w szereg Taylora

$$F(s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \left(\frac{d^n F(s)}{ds^n} \right)_{s=0}. \quad (\text{B.5})$$

Rozwinięcie to możemy zastosować do funkcji $F(s) = e^{-s^2+2sx}$ pisząc

$$e^{-s^2+2sx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \left(\frac{d^n}{ds^n} e^{-s^2+2sx} \right)_{s=0}, \quad (\text{B.6})$$

skąd, po podstawieniu wyrażenia (B.4), otrzymamy

$$e^{-s^2+2sx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(x). \quad (\text{B.7})$$

Funkcję stojącą po prawej nazwiemy funkcją tworzącą wielomianów Hermite'a. Wzór Rodriguesa definiujący $H_n(x)$ jest równoważny definicji (B.7) przez funkcję tworzącą.

B.2 Relacje rekurencyjne i równanie różniczkowe Hermite'a

Szereg związków pomiędzy wielomianami Hermite'a ujmijemy w postaci krótkich twierdzeń.

Lemat B.1 *Wielomiany Hermite'a spełniają relację rekurencyjną*

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - \frac{d}{dx} H_n(x). \quad (\text{B.8})$$

Dowód. Różniczkując obustronnie wzór Rodriguesa (B.1) mamy

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} H_n(x) &= (-1)^n \frac{d}{dx} \left(e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \right) \\ &= (-1)^n \left[2xe^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} + e^{x^2} \frac{d^{n+1}}{dx^{n+1}} e^{-x^2} \right] \\ &= 2xH_n(x) - H_{n+1}(x). \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Po elementarnym przekształceniu mamy więc tezę. ■

Lemat B.2 *Pochodna z wielomianu Hermite'a wyraża się wzorem*

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = 2nH_{n-1}(x). \quad (\text{B.10})$$

Dowód. Definicję funkcji tworzącej (B.7) różniczkujemy obustronnie względem x

$$\frac{d}{dx} e^{-s^2+2sx} = 2s e^{-s^2+2sx} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{d}{dx} H_n(x), \quad (\text{B.11})$$

gdzie wyraz $n=0$ po prawej znika, ponieważ $H_0(x) = 1$. Ponownie stosując (B.7) mamy

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{2s^{k+1}}{k!} H_k(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{d}{dx} H_n(x). \quad (\text{B.12})$$

Po lewej zamieniamy indeks sumowania $k \rightarrow n = k+1$, przy czym $n = 1, 2, \dots$ i otrzymujemy

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2s^n}{(n-1)!} H_{n-1}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{d}{dx} H_n(x). \quad (\text{B.13})$$

Współczynniki przy tych samych potęgach zmiennej s muszą być równe, wobec tego

$$\frac{2}{(n-1)!} H_{n-1}(x) = \frac{1}{n!} \frac{d}{dx} H_n(x). \quad (\text{B.14})$$

Po uproszczeniu dostajemy tezę. ■

Lemat B.3 *Wielomiany Hermite'a spełniają relację rekurencyjną*

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x). \quad (\text{B.15})$$

Dowód. Teza wynika z podstawienia wzoru (B.10) do relacji rekurencyjnej (B.8). ■

Twierdzenie B.1 *Wielomiany Hermite'a spełniają równanie różniczkowe (tzw. równanie Hermite'a)*

$$\frac{d^2}{dx^2} H_n(x) - 2x \frac{d}{dx} H_n(x) + 2n H_n(x) = 0. \quad (\text{B.16})$$

Dowód. Weźmy relację rekurencyjną (B.8) i zróżniczkujemy

$$\frac{d}{dx} H_{n+1}(x) = 2H_n(x) + 2x \frac{d}{dx} H_n(x) - \frac{d^2}{dx^2} H_n(x). \quad (\text{B.17})$$

Stąd wynika

$$\frac{d^2}{dx^2} H_n(x) - 2x \frac{d}{dx} H_n(x) - 2H_n(x) = -\frac{d}{dx} H_{n+1}(x). \quad (\text{B.18})$$

Do wyrażenia po prawej stronie stosujemy relację (B.10) otrzymując

$$\frac{d^2}{dx^2} H_n(x) - 2x \frac{d}{dx} H_n(x) - 2H_n(x) = -2(n+1)H_n(x). \quad (\text{B.19})$$

Po uproszczeniu mamy tezę. ■

B.3 Całki z wielomianami Hermite'a

Wielomiany Hermite'a wchodzą do wielu całek spotykanych przy rozwiązywaniu różnorodnych zagadnień fizycznych. W tym rozdziale skupimy się na przedstawieniu metody obliczania następujących całek

$$I_{kn}^{(p)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) y^p e^{-y^2}. \quad (\text{B.20})$$

Posłużymy się funkcją tworzącą wielomianów Hermite'a i zbadamy całkę pomocniczą

$$J(s, t, a) = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-s^2+2sy} e^{-t^2+2ty} e^{2ay-y^2}. \quad (\text{B.21})$$

Przedstawiając funkcje wykładnicze za pomocą ich rozwinięć dostajemy

$$\begin{aligned} J(s, t, a) &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \sum_{k=0}^{\infty} \frac{s^k}{k!} H_k(y) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(y) \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(2a)^p}{p!} y^p e^{-y^2} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{s^k t^n (2a)^p}{k! n! p!} \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) y^p e^{-y^2} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{s^k t^n (2a)^p}{k! n! p!} I_{kn}^{(p)}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Trzeba więc obliczyć całkę J , a następnie wynik rozwinąć w szereg. Porównując współczynniki rozwinięć przy odpowiednich potęgach parametrów s , t oraz a możemy później odczytać wartości całek $I_{kn}^{(p)}$. Przede wszystkim więc trzeba obliczyć całkę J . Wychodząc z określenia (B.21)

$$\begin{aligned} J(s, t, a) &= e^{-s^2-t^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2+2y(s+t+a)} \\ &= e^{-s^2-t^2+(s+t+a)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2+2y(s+t+a)-(s+t+a)^2} \\ &= e^{-s^2-t^2+(s+t+a)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\{-[y-(s+t+a)]^2\} \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Biorąc nową zmienną całkowania $z = y - (s + t + a)$, sprowadzamy pozostałą całkę do postaci "tablicowej" i otrzymujemy

$$J(s, t, a) = e^{-s^2-t^2+(s+t+a)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-z^2} = \sqrt{\pi} e^{a^2+2st+2sa+2ta} \quad (\text{B.24})$$

Uzyskane dla całki J wyrażenie rozwijamy w szereg

$$\begin{aligned} J(s, t, a) &= \sqrt{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a^2 + 2st + 2sa + 2ta)^m}{m!} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[2st + (a^2 + 2sa + 2ta)]^m}{m!} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{l=0}^m \binom{m}{l} (2st)^l (a^2 + 2sa + 2ta)^{m-l}, \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

gdzie w ostatnim kroku skorzystaliśmy z rozwinięcia dwumianowego.

Zestawmy teraz rozwinięcia (B.22) i (B.25) całki pomocniczej J

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{s^k t^n (2a)^p}{k! n! p!} I_{kn}^{(p)} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi}}{m!} \sum_{l=0}^m \binom{m}{l} (2st)^l (a^2 + 2sa + 2ta)^{m-l}. \quad (\text{B.26})$$

Możnaby dalej ciągnąć ogólne rozważania i starać się porównywać współczynniki rozwinięć po obu stronach. Takie ogólne rachunki są jednak dość skomplikowane, poprzestaniemy więc na szczegółowym omówieniu dwóch przypadków szczególnych.

Przypadek $p = 0$

Przypadek odpowiada całce

$$I_{kn}^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) e^{-y^2}, \quad (\text{B.27})$$

czyli tzw. całce ortogonalizacyjnej wielomianów Hermite'a. W tym przypadku ($p = 0$), po lewej stronie wzoru (B.26) interesują nas jedynie te człony rozwinięcia, w których nie występuje parametr a . Wobec tego parametr ten nie może również występować w odpowiednich członach po stronie prawej. Możliwe to jest jedynie w tych wyrazach, w których $m = l$. Symbol dwumianowy daje wówczas 1 i możemy napisać

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^k t^n}{k! n!} I_{kn}^{(0)} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi}}{m!} (2st)^m \quad (\text{B.28})$$

Po prawej parametry s i t występują w tej samej potęgze, a zatem po lewej zostają jedynie te wyrazy, w których $k = n$. Oznacza to, że

$$I_{kn}^{(0)} = I_{nn}^{(0)} \delta_{kn}, \quad (\text{B.29})$$

biorąc to pod uwagę, z (B.28) dalej otrzymujemy

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n t^n}{(n!)^2} I_{nn}^{(0)} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi}}{m!} 2^m s^m t^m. \quad (\text{B.30})$$

Stąd już bez trudu odczytujemy wartość poszukiwanej całki

$$I_{nn}^{(0)} = 2^n n! \sqrt{\pi}. \quad (\text{B.31})$$

Łącząc formuły (B.27), (B.29) oraz (B.31) finalnie mamy

$$I_{kn}^{(0)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) e^{-y^2} = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{kn}, \quad (\text{B.32})$$

co kończy obliczenia całki ortogonalizacyjnej wielomianów Hermite'a.

Przypadek $p = 1$

Badamy więc teraz całkę

$$I_{kn}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) y e^{-y^2}. \quad (\text{B.33})$$

Tym razem w relacji (B.26) powinniśmy wyodrębnić człony, w których $p = 1$, a więc z parametrem a w pierwszej potęgze. A zatem po prawej także interesują nas składniki w których występuje $a = a^1$. Człony takie odpowiadają więc przypadkowi, w którym $m - l = 1$. Zauważmy przy tym, że człon $m = 0$ nie może dać wkładu, zatem możemy go pominąć, co więcej przyczynę od a^2 także jest nam niepotrzebny więc i jego możemy także pominąć. W ten sposób, z (B.26) dostajemy

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^k t^n}{k! n!} 2a I_{kn}^{(p)} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi}}{m!} \binom{m}{m-1} 2a (2st)^{m-1} (s+t). \quad (\text{B.34})$$

Czynnik $2a$ występujący po obu stronach się skraca, symbol dwumianowy jest równy m . Wobec tego

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^k t^n}{k! n!} I_{kn}^{(p)} &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sqrt{\pi}}{(m-1)!} (2st)^{m-1} (s+t) \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2^m s^m t^m (s+t)}{m}, \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

gdzie "przesunęliśmy" indeks sumacyjny. Rozpisując prawą stronę, gdzie zamieniamy indeks sumowania, otrzymujemy

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^k t^n}{k! n!} I_{kn}^{(1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k \sqrt{\pi}}{k!} (s^{k+1} t^k + s^k t^{k+1}) \equiv \mathcal{P}. \quad (\text{B.36})$$

Aby teraz odczytać współczynniki rozwinięcia, zajmiemy się odpowiednim przekształceniem prawej strony.

$$\mathcal{P} = \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k}{k!} t^k \sum_{n=0}^{\infty} s^n \delta_{n,k+1} + \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^k}{k!} s^k \sum_{n=0}^{\infty} t^n \delta_{n,k+1} \quad (\text{B.37})$$

W pierwszej sumie zamieniamy nazwy indeksów sumowania $n \leftrightarrow k$, otrzymując

$$\begin{aligned} \mathcal{P} &= \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} t^n s^k \delta_{k,n+1} + \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^k}{k!} s^k t^n \delta_{n,k+1} \\ &= \sqrt{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^k t^n}{k! n!} \left(2^n k! \delta_{k,n+1} + 2^k n! \delta_{n,k+1} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Ponieważ $\delta_{k,n+1} = \delta_{n,k-1}$, więc przyrównując lewą stronę (B.36) i prawą (B.38) mamy poszukiwane współczynniki rozwinięcia. A zatem

$$\begin{aligned} I_{kn}^{(1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) y e^{-y^2} \\ &= \sqrt{\pi} \left(2^n k! \delta_{n,k-1} + 2^k n! \delta_{n,k+1} \right) \\ &= \sqrt{\pi} \left[2^n (n+1)! \delta_{n,k-1} + 2^{n-1} n! \delta_{n,k+1} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

gdzie w drugiej linii skorzystaliśmy z własności delt Kroneckera. Całka $I_{kn}^{(1)}$ jest więc obliczona "do końca".

B.4 Inne sposoby obliczania całek

Całka $I_{kn}^{(1)}$

Ponownie zajmijmy się całką

$$I_{kn}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) y e^{-y^2}, \quad (\text{B.40})$$

ale teraz policzymy ją zupełnie inną metodą. Występujący w obliczanej całce czynnik $y H_n(y)$ wyrazimy za pomocą relacji rekurencyjnej (B.15), która pozwala napisać

$$y H_n(y) = \frac{1}{2} H_{n+1}(y) + n H_{n-1}(y), \quad (\text{B.41})$$

co po wstawieniu do (B.40) daje nam

$$I_{kn}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) \left(\frac{1}{2} H_{n+1}(y) + n H_{n-1}(y) \right) e^{-y^2}. \quad (\text{B.42})$$

Całka ta jest złożona z dwóch całek, przy czym każda z nich jest typu całki ortogonalizacyjnej (B.32). Wobec tego bez trudu otrzymujemy

$$I_{kn}^{(1)} = \left[\frac{1}{2} 2^k k! \sqrt{\pi} \delta_{k,n+1} + n 2^k k! \sqrt{\pi} \delta_{k,n-1} \right]. \quad (\text{B.43})$$

Korzystając z własności delt Kroneckera otrzymujemy

$$I_{kn}^{(1)} = \sqrt{\pi} \left[2^n (n+1)! \delta_{n,k-1} + 2^{n-1} n! \delta_{n,k+1} \right]. \quad (\text{B.44})$$

co kończy obliczenia całki $I_{kn}^{(1)}$, bowiem mamy rezultat identyczny z wynikiem (B.39). Powyżej przedstawione obliczenia za pomocą funkcji tworzącej są nieco bardziej złożone niż te, w których korzystaliśmy z relacji rekurencyjnej dla wielomianów Hermite'a. Mimo to jednak, w wielu innych zastosowaniach, metoda funkcji tworzącej bywa niezwykle pożyteczna.

* * * * *