ANNALES DE L'I. H. P., SECTION C

A. SEGHIER

Extension de fonctions de type positif et entropie associée. Cas multidimensionnel

Annales de l'I. H. P., section C, tome 8, nº 6 (1991), p. 651-675
<http://www.numdam.org/item?id=AIHPC_1991__8_6_651_0>

Ann. Inst. Henri Poincaré,

Vol. 8, n° 6, 1991, p. 651-675. *Analyse non linéaire*

Extension de fonctions de type positif et entropie associée. Cas multidimensionnel

par

A. SEGHIER

Université de Paris-Sud,
Departement de Mathématiques, 91405 Orsay Cedex

RÉSUMÉ. — Nous avons donné dans une précédente note [7] des conditions suffisantes simples pour la reconstruction effective de densités spectrales. Il s'avère que le cadre naturel de ces résultats est le problème de l'extension de fonctions de type positif dans le cadre multidimensionnel [6]. Une analyse plus poussée, dans ce cadre, des résultats mentionnés ci-dessus, montre qu'ils sont applicables au problème de phases en cristallographie.

Mots clés : Fonctions de type positif, extensions, entropie et maximum d'entropie, cristallographie.

ABSTRACT. — In an earlier note [7] we gave simple conditions which were sufficient for the effective reconstruction of spectral densities. Clearly the natural setting for these results is the problem of the extension of positive type in the multidimensionnal case [6]. Further analysis, in this framework, of the results mentionned above shows that they are applicable to the phase problem in cristallography. Illustrative examples of such extensions are given.

Classification A.M.S. : 42 A 82, 42 B 05, 45 E 10.

INTRODUCTION

Soit Λ_+ une partie finie de $\mathbb{Z}^d$ ($\mathbb{Z}$ est l'ensemble des entiers relatifs et d un entier $\geqq 1$) dont on précisera la nature plus loin. On considère des fonctions de type positif définies sur la partie $\wedge = \Lambda_+ - \Lambda_+$ de $\mathbb{Z}^d$, constituée par les points $m-n$, avec $m=(m_1, \ldots, m_d) \in \Lambda_+$, $n=(n_1, \ldots, n_d) \in \Lambda_+$.

Soit $(c_m)_{m \in \Lambda}$ une suite de nombres complexes tels que $\bar{c}_m = c_{-m}$. Cette suite est une fonction de type positif si et seulement si pour toute suite $(a_k)_{k \in \Lambda_+}$ de nombres complexes on ait

$$\sum\sum a_k \bar{a}_l c_{k-l} \geqq 0 \qquad \text{(où la somme est étendue à } \Lambda_+ \times \Lambda_+\text{)}.$$

Le problème abordé dans ce travail consiste à déterminer les conditions pour lesquelles cette suite $(c_k)_{k \in \Lambda}$ est la restriction d'une suite de type positif $(d_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ définie sur tout le groupe $\mathbb{Z}^d$. Autrement dit, existe-t-il une suite $(d_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ vérifiant les conditions suivantes

$$(\mathrm{E}) \quad \begin{cases} (a) \text{ pour tout } k \in \Lambda,\ d_k = c_k \\ (b) \text{ pour toute suite finie } (b_k) \text{ de nombres complexes} \\ \text{(l'indice } k \text{ varie dans une partie finie de } \mathbb{Z}^d\text{), on a} \\ \qquad\qquad \sum\sum b_k \bar{b}_l d_{k-l} \geqq 0 \,? \end{cases}$$

Lorsqu'une telle suite $(dk)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ existe, on dit que c'est une extension de $(c_k)_{k \in \Lambda}$.

M. G. Krein a établi (*voir* [6]) qu'il existe toujours, dans le cas $d=1$, une extension répondant au problème (E).

Dans le cas $d \geqq 2$, A. Calderòn [1], d'une part, et W. Rudin [6] d'autre part, ont montré indépendamment que le problème de l'extension décrit ci-dessus n'a pas toujours de solution.

C'est un théorème de Hilbert (1888), établissant l'existence d'un polynôme positif (de plusieurs variables) qui ne s'écrit pas comme une somme de carré de polynômes, qui a permis à ces deux auteurs de montrer l'impossibilité, pour $d \geqq 2$, de l'extension dans tous les cas. Les résultats que nous proposons dans ce travail permettent des constructions effectives d'extension grâce à une condition suffisante simple.

Un autre aspect important du problème décrit ci-dessus, dans le cadre des applications, est le lien étroit de ces questions avec le problème des phases en cristallographie, dont voici une brève description : on dispose d'un nombre fini de coefficients de Fourier, indexés par une partie de $\mathbb{Z}^3$, d'une densité électronique (dans notre langage il s'agira d'une mesure positive sur le 3-tore). Pour une partie de ces coefficients, seuls les modules seront donnés (les phases sont inconnues).

Il s'agira alors de « reconstruire » cette densité à partir de ces informations partielles.

Le problème des phases ainsi présenté (sous forme simplifiée), correspond exactement au problème d'extension de fonctions de type positif (*voir* A. Calderòn et R. Pepinsky [1]).

Composition de l'article :

Nous présentons dans la première partie le résultat principal (annoncé sous une autre forme dans [7]), qui sera un théorème d'extension (constructible). L'extension se présente non pas sous la forme d'une suite $(d_k)_{k\in\mathbb{Z}^d}$, mais d'un quotient de deux polynômes trigonométriques de plusieurs variables (et positifs) dont les coefficients de Fourier constituent la suite $(d_k)_{k\in\mathbb{Z}^d}$ solution du problème d'extension (E).

On étudiera dans la seconde partie les propriétés d'extensions extrémales en liaison avec le principe du maximum d'entropie. Nous donnerons ensuite, comme conséquence du théorème principal, une version paramétrée des résultats précédents.

On supposera plus précisément qu'une partie des données dépend d'une famille de paramètres, (ce qui est le cas dans le problème des phases en cristallographie, les phases inconnues étant considérées comme des paramètres). Les constructions effectives que l'on obtient prennent en compte cette dépendance. Et là se trouve l'intérêt de la démarche en vue des applications.

Notations. — Soit $\mathbb{S}$ un « demi-espace » de $\mathbb{Z}^d$ caractérisé par les propriétés suivantes

1. $(0, \ldots, 0)\in\mathbb{S}$.
2. $(m_1, \ldots, m_d)\in\mathbb{S}$ si et seulement si $(-m_1, \ldots, -m_d)\notin\mathbb{S}$, excepté pour le point $(0, \ldots, 0)$.
3. $\{(m_1, \ldots, m_d)\in\mathbb{S}$ et $(n_1, \ldots, n_d)\in\mathbb{S}\}$ impliquent

$$(m_1+n_1, \ldots, m_d+n_d)\in\mathbb{S}.$$

On trouvera dans [4], l'introduction de ces « demi-espaces » par Helson et Lowdenslager, l'objectif étant de généraliser, dans la théorie de la prédiction, la notion de passé et de futur d'un processus stochastique multi-dimensionnel (on dit aussi champs aléatoire). On précise à ce niveau la partie Λ_+ dont il a été question dans l'introduction.

Soit Λ_+ une partie finie contenue dans $\mathbb{S}$,

$$\Lambda=\Lambda_+-\Lambda_+=\{m-n, (m, n)\in\Lambda_+\times\Lambda_+\}$$

et

$$\Lambda_*=\Lambda_+\setminus\{(0, \ldots, 0, 0)\}.$$

On note par $\chi:(\theta_1, \ldots, \theta_d)\to e^{i\theta_1+\cdots+i\theta_d}$ la fonction exponentielle définie sur le tore multi-dimensionnel $\mathbb{T}^d$, $d\sigma$ la mesure de Haar associée et

$$\chi^n(\theta_1, \ldots, \theta_d)=e^{i(n_1\theta_1+\cdots+n_d\theta_d)}, \qquad n=(n_1, \ldots, n_d).$$

On note, pour une partie finie M de $\mathbb{Z}^d$, $\mathscr{P}(\mathrm{M})$ l'ensemble des polynômes trigonométriques engendré par les exponentielles $\{\chi^n, n \in \mathrm{M}\}$ et $f = \sum_{k \in \Lambda} c_k \chi^k$ sera le polynôme trigonométrique formé à l'aide de la suite finie $(c_k)_{k \in \Lambda}$ qui définit la fonction de type positif dont on cherche les extensions (on notera que f est réelle).

La propriété de positivité de la suite $(c_k)_{k \in \Lambda}$ peut se traduire par la relation équivalente suivante :

$$\int \Big| \sum_{k \in \Lambda_+} a_k \chi^k \Big|^2 f \, d\sigma \geqq 0 \tag{1}$$

et ceci pour tout $\mathrm{P} = \sum_{k \in \Lambda_+} a_k \chi^k \in \mathscr{P}(\Lambda_+)$. Remarquons que le polynôme f n'est pas forcément positif. Nous supposerons dans la suite que la matrice $\mathrm{T}_\Lambda = (c_{l-k})_{(k, l) \in \Lambda_+ \times \Lambda_+}$ est inversible, elle est donc définie strictement positive et l'expression (1) ne s'annule que pour le polynôme nul. On peut définir un produit scalaire sur le sous-espace $\mathscr{P}(\Lambda_+)$ par :

$$\forall (\mathrm{P}_1, \mathrm{P}_2) \in \mathscr{P}(\Lambda_+) \times \mathscr{P}(\Lambda_+), \qquad \langle \mathrm{P}_1, \mathrm{P}_2 \rangle_f = \int_{\mathbb{T}^d} \mathrm{P}_1 \bar{\mathrm{P}}_2 f \, d\sigma$$

Considérons la relation suivante qui permet de définir le polynôme extrémal $1 + \mathrm{P}_0$, dont le rôle est fondamental par la suite, $\mathrm{P}_0 \in \mathscr{P}(\Lambda_*)$ et

$$\int |1 + \mathrm{P}_0|^2 f d\sigma = \inf_{\mathrm{P}} \int |1 + \mathrm{P}|^2 f \, d\sigma, \qquad \text{où} \quad \mathrm{P} \in \mathscr{P}(\Lambda_*). \tag{2}$$

Les intégrales sont étendues à $\mathbb{T}^d$.

Le polynôme $1 + \mathrm{P}_0$ est l'élément minimal du convexe fermé $\Sigma = \{1 + \mathrm{P}, \mathrm{P} \in \mathscr{P}(\Lambda_*)\}$. On peut aussi interpréter la relation (2) en observant que $-\mathrm{P}_0$ est la projection orthogonale de 1 sur le sous-espace $\mathscr{P}(\Lambda_*)$, muni du produit scalaire défini ci-dessus.

Nous allons décrire des sous-espaces de $\mathrm{L}^2(\mathbb{T}^d)$ qui seront utiles par la suite.

Les polynômes $\mathrm{Q} = \sum_{k \in \mathbb{S}} b_k \chi^k$, $k \in \mathbb{S}$, engendrent dans $\mathrm{L}^2(\mathbb{T}^d)$ un sous-espace (de Hardy) $\mathrm{H}^2(\mathbb{S})$. On définit $\mathrm{H}^\infty(\mathbb{S}) = \mathrm{H}^2(\mathbb{S}) \cap \mathrm{L}^\infty(\mathbb{T}^d)$.

Pour une partie W de $\mathbb{S}$, on notera $\mathrm{H}^2(\mathrm{W})$ le sous-espace fermé de $\mathrm{L}^2(\mathbb{T}^d)$ engendré par les exponentielles $\{\chi^w, w \in \mathrm{W}\}$.

On notera, pour une partie finie M de $\mathbb{Z}^d$, π_M le projecteur orthogonal de $\mathrm{L}^2(\mathbb{T}^d)$ sur le sous-espace $\mathscr{P}(\mathrm{M})$ (de polynômes trigonométriques).

I. CONSTRUCTION D'UNE FONCTION D'EXTENSION SOUS FORME DE FRACTION RATIONNELLE

Le résultat qui suit présente une extension sous forme de fraction rationnelle $h = P_1/|1+Po|^2$, où $P_1 \in \mathscr{P}(-\Lambda' \cup \Lambda')$ est un polynôme trigonométrique réel, explicite et où $\Lambda' = (\Lambda \cap s) + \Lambda_+$.

Posons $\mathbb{U} = (\mathbb{S} \cap \Lambda) \setminus \Lambda_+$ et $\mathbb{V} = \mathbb{S} \setminus (\mathbb{S} \cap \Lambda)$ et précisons la forme de P_1. L'objet de la démonstration du théorème qui va suivre est l'existence et l'unicité d'un élément g, lorsque la densité h (à construire) s'écrit sous la forme

$$h = f + g + \bar{g}$$

g sera un élément de $H^2(\mathbb{V})$.

Grâce à cette construction de g, on pourra définir un polynôme $D_{\mathbb{U}}$ dont le rôle sera essentiel dans la caractérisation d'extensions positives. On posera

$$D_{\mathbb{U}} = \pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)h = \pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)(g+\bar{g}) + \pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)f.$$

Le polynôme P_1 est alors explicite et s'écrira

$$P_1 = \mu^2 + 2\,\mathrm{Re}(\pi_{\mathbb{S}}\overline{(1+P_0)}D_{\mathbb{U}}). \tag{3}$$

μ^2 est une constante positive qui sera définie en (5).

THÉORÈME 1. — *On suppose que* $(1+P_0)^{-1} \in H^\infty(\mathbb{S})$. *On peut alors construire un polynôme* P_1 *décrit en* (3) *tel que la fraction rationnelle* $h = P_1/|1+P_0|^2$ *vérifie*

$$\forall k \in \Lambda, \qquad \hat{h}(k) = c_k.$$

La fonction h est solution du problème d'extension dès que le polynôme P_1 *est positif.*

Preuve. — Comme l'élément $-P_0$ est la projection orthogonale de 1 sur le sous-espace $\mathscr{P}(\Lambda_*)$ (par rapport au produit scalaire défini ci-dessus) l'élément $1+P_0$ est orthogonal au sous-espace $\mathscr{P}(\Lambda_*)$. On a ainsi

$$\langle 1+P_0, \chi^m \rangle_f = \int (1+P_0)\chi^{-m} f\,d\sigma = 0, \qquad \forall m \in \Lambda_*. \tag{4}$$

Puisque $P_0 \in \mathscr{P}(\Lambda_*)$, on a

$$\langle 1+P_0, P_0 \rangle_f = 0$$

et

$$\langle 1+P_0, 1+P_0 \rangle_f = \langle 1+P_0, 1 \rangle_f + \langle 1+P_0, P_0 \rangle_f = \langle 1+P_0, 1 \rangle_f.$$

En utilisant la forme intégrale du produit scalaire cette dernière expression s'écrit

$$\int (1+P_0) f\,d\sigma = \int |1+P_0|^2 f\,d\sigma \overset{\text{def}}{=} \mu^2 \tag{5}$$

Construction de h. — Il s'agit de déterminer un élément h qui s'écrit $h=f+g+\bar{g}$, avec $g\in H^2(\mathbb{V})$, et h sous forme de fraction rationnelle décrite ci-dessus. Si un tel élément h existe, il vérifie nécessairement les relations d'orthogonalité suivantes

$$\int |1+P_0|^2 h\,d\sigma=\mu^2; \tag{6}$$

$$\int (1+P_0)\,h\,\chi^{-m}\,d\sigma=0, \qquad \forall m\in\mathbb{V}\cup\Lambda_*. \tag{7}$$

Ceci est dû à la définition de h et au fait que f vérifie des relations identiques [les relations (4) et (5)].

Remarquons que dans les relations (6) et (7) seules les exponentielles indexées par $\mathbb{S}/\mathbb{U}$ interviennent.

Dès que la construction de h est réalisée, on disposera d'une extension qui ne sera pas forcément positive. Cependant le polynôme $D_{\mathbb{U}}$ décrit précédemment permettra de caractériser les extensions positives. Appliquant le projecteur $\pi_{\mathbb{V}}(\mathbb{V}\subset\mathbb{S})$ à l'élément $(1+P_0)\,h$, on obtient

$$\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)\,h=\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)\,(g+\bar{g})+\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)\,f=0.$$

La fonction $g+\bar{g}$ à chercher vérifie donc l'équation

$$\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)\,(g+\bar{g}))=-\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)\,f. \tag{9}$$

Si l'équation précédente a une solution en g, on en déduit immédiatement h (et si $h\geqq 0$, la solution du problème).

Nous allons résoudre l'équation (9).

Une formulation différente de (9) nous amène à montrer qu'un opérateur est inversible.

Posons, pour $\varphi\in L^2(\mathbb{T}^d)$, $J\varphi=\bar{\varphi}$. L'opérateur J définit une isométrie.

$$\mathbb{A}\,g\overset{\text{def}}{=}\pi_{\mathbb{V}}((1+P_0)\,g+((1+P_0)/\overline{(1+P_0)}) \times J\,(1+P_0)\,\bar{g})=-\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)\,f) \tag{10}$$

$\mathbb{A}$ ainsi défini est un opérateur de $H^2(\mathbb{V})$ dans lui-même.

Montrons qu'il est inversible.

Étape 1. — On posera désormais $\pi_{\mathbb{V}}=\pi$.

Il existe une constante positive γ, $0<\gamma<1$, telle que

$$\forall u\in H^2(\mathbb{V}),$$
$$\|\pi(1+P_0)\,u+\pi(1+P_0)\,\bar{u}\|^2\geqq(1-\gamma)\,(\|\pi(1+P_0)\,u\|^2+\|\pi(1+P_0)\,\bar{u}\|^2).$$

En effet le premier membre de l'inégalité ci-dessus est égal à

$$\|\pi(1+P_0)\,u\|^2+\|\pi(1+P_0)\,\bar{u}\|^2+2\operatorname{Re}\langle\pi(1+P_0)\,u,\ \pi(1+P_0)\,\bar{u})\rangle \tag{11}$$

Considérons le produit scalaire qui intervient dans l'expression précédente

$$\langle\pi(1+P_0)\,u,\ \pi(1+P_0)\,\bar{u}\rangle=\langle\pi(1+P_0)\,u,\ (1+P_0)\,\bar{u}\rangle. \tag{12}$$

C'est le produit scalaire d'éléments

$$\pi(1+P_0)u\in H^2(\mathbb{V}) \qquad \text{et} \qquad (1+P_0)\bar{u}\in(1+P_0)\overline{H^2(\mathbb{V})}.$$

La somme des deux sous-espaces précédents

$$H^2(\mathbb{V})+(1+P_0)\overline{H^2(\mathbb{V})}=(1+P_0)[((1/(1+P_0))H^2(\mathbb{V})+\overline{H^2(\mathbb{V})}]$$

est fermée. En effet l'hypothèse $(1+P_0)^{-1}\in H^2(\mathbb{S})$ implique que les sous-espaces $((1+P_0)^{-1})H^2(\mathbb{V})\subset H^2(\mathbb{S})$ et $\overline{H^2(\mathbb{V})}$ sont orthogonaux (on rappelle que $\mathbb{V}$ est strictement contenu dans $\mathbb{S}$). Comme ils sont fermés dans $L^2(\mathbb{T}^d)$, leur somme est aussi fermée dans cet espace. En multipliant la somme de ces sous-espaces par $1+P_0$ on obtient immédiatement que la somme $H^2(\mathbb{V})+(1+P_0)\overline{H^2(\mathbb{V})}$ est fermée, et que

$$H^2(\mathbb{V})\cap(1+P_0)\overline{H^2(\mathbb{V})}=\{0\}.$$

Ceci équivaut d'après un lemme classique à l'assertion suivante : il existe une constante γ, $0<\gamma<1$, telle que pour tout couple

$$(\psi_1, \psi_2)\in(1+P_0)\overline{H^2(\mathbb{V})},$$

et vérifiant $\|\psi_1\|=\|\psi_2\|=1$, on ait

$$|\langle\psi_1, \psi_2\rangle|\leqq\gamma<1.$$

Cette inégalité entraîne une majoration de la norme de $\pi=\pi_{\mathbb{V}}$. En effet soit ψ_2 un élément de $(1+P_0)H^2(\mathbb{V})$ et ψ_1 un élément quelconque de $H^2(\mathbb{V})$, on a

$$\|\pi_{\mathbb{V}}(\psi_2)\|=\sup_{\|\mu_1\|=1}\langle\psi_1, \psi_2\rangle|\leqq\gamma\|\psi_2\|$$

Ainsi le produit scalaire dans (12) peut être majoré

$$2\langle\pi(1+P_0)u, \pi(1+P_0)\bar{u}\rangle|\leqq 2\gamma(\|\pi(1+P_0)u\|.\|(1+P_0)\bar{u}\|)$$
$$\leqq\gamma(\|\pi(1+P_0)u\|^2+\|(1+P_0)\bar{u}\|^2).$$

et la norme dans l'expression (11) est minorée par

$$(12)\quad \|\pi(1+P_0)u+\pi(1+P_0)\bar{u}\|^2$$
$$\geqq(1-\gamma)(\|\pi(1+P_0)\bar{u}\|^2+\|(1+P_0)\bar{u}\|^2).$$

Étape 2. — Il existe une constante $m>0$ telle que $\forall u\in H^2(\mathbb{V})$ on ait

$$\|\pi(1+P_0)u+\pi(1+P_0)\bar{u}\|^2\geqq m\|u\|^2.$$

Supposons le contraire : il existe une suite (u_n), $u_n\in H^2(\mathbb{V})$, de norme minorée par une constante positive (on prendra par exemple u_n vérifiant $\|(1+P_0)u_n\|=1$, cela est possible car $\inf|1+P_0|>0$), telle que $\|\pi(1+P_0)u_n+\pi(1+P_0)\bar{u}_n\|^2$ tende vers zéro.

L'inégalité (12) implique immédiatement que $\|\pi(1+P_0)u_n\|$ et $\|(I-\pi)(1+P_0)u_n\|$ tendent respectivement vers zéro et vers 1, lorsque n tend vers l'infini [I est l'opérateur identité sur $H^2(\mathbb{S})$ et $(1+P_0)u_n\in H^2(\mathbb{S})$].

Il s'ensuit que la suite $\{(\mathrm{I}-\pi)(1+\mathrm{P}_0)\,u_n\}$ reste bornée. D'autre part, comme $(\mathrm{I}-\pi)(1+\mathrm{P}_0)\,\mathrm{H}^2(\mathbb{V})$ est contenu dans $\mathrm{H}^2(\mathbb{S}\cap\Lambda)$, sous-espace engendré par les exponentielles indexées par $\mathrm{S}\cap\Lambda$, et que $\mathbb{S}\cap\Lambda$ est une partie finie de $\mathbb{Z}^d$, les deux sous-espaces précédents sont de dimension finie. La boule unité de ce sous-espace étant compacte et la suite $\{(\mathrm{I}-\pi)(1+\mathrm{P}_0)\,u_n\}$ bornée, on peut en extraire une sous-suite qui converge vers un élément ψ_0 du sous-espace correspondant. Ce sous-espace étant fermé, il existe un élément $q_0\in\mathrm{H}^2(\mathbb{V})$ tel que

$$\psi_0=(\mathrm{I}-\pi)(1+\mathrm{P}_0)\,q_0.$$

Cet élément vérifie donc $\|(\mathrm{I}-\pi)(1+\mathrm{P}_0)\,q_0\|=\|(1+\mathrm{P}_0))\,q_0\|=1$, ce qui signifie encore que $(1+\mathrm{P}_0)\,q_0\in\mathrm{H}^2(\mathbb{S}\cap\Lambda)$, soit τ_0 ce polynôme; il vérifie la relation $\pi_{\mathbb{V}}(\tau_0/(1+\mathrm{P}_0))=0$, avec $\mathbb{W}=\mathbb{S}\cap\Lambda=\mathscr{S}\setminus\mathscr{V}$.

Montrons que τ_0 est nul. Pour cela posons $\varphi=1/(1+\mathrm{P}_0)$, la relation précédente est équivalente au système linéaire suivant :

$$(13)\qquad \sum\hat{\varphi}(k-j)\,\hat{\tau}_0(j)=0 \qquad (k,j)\in\mathbb{W}\times\mathbb{W}.$$

Comme $\varphi\in\mathrm{H}^2(\mathbb{S})$, $\hat{\varphi}(k-j)=0$ pour $k-j\in-\mathbb{S}$ et $k\neq j$, le système linéaire est triangulaire (par rapport à un ordre bien choisi de la partie $\mathbb{W}$), en outre $\varphi(0)=1$. Il s'ensuit que le système linéaire (13) a une solution unique qui équivaut à $\tau_0=0$. Ceci contredit le fait que $\|\tau_0\|=\|(1+\mathrm{P}_0)\,q_0\|=1$. L'hypothèse faite au début de l'étape 2 est donc absurde et il existe bien $\varepsilon>0$ tel que $\forall\,u\in\mathrm{H}^2(\mathbb{V})$, $\|\pi(1+\mathrm{P}_0)\,u\|\geqq\varepsilon\,\|u\|$. Il s'ensuit de cette inégalité et de l'inégalité (12) de l'étape 1 qu'il existe une constante positive $m>0$ telle que l'on ait

$$(14)\qquad \|\pi(1+\mathrm{P}_0)\,\bar{u}+\pi(1+\mathrm{P}_0)\,u\|\geqq m\,\|u\|^2.$$

Étape 3. — Montrons que l'opérateur défini dans (3) est inversible. Soit π_- le projecteur orthogonal de $\mathrm{L}^2(\mathbb{T}^d)$ sur $\overline{\mathrm{H}^2(\mathbb{V})}$. On considère l'opérateur suivant

$$\forall\,u\in\mathrm{H}^2(\mathbb{V}),\quad u+\bar{u}\to\pi_-\,\overline{(1+\mathrm{P}_0)}\,(u+\bar{u})+\pi(1+\mathrm{P}_0)\,(u+\bar{u})$$

Cet opérateur défini sur $\mathscr{M}\overset{\mathrm{def}}{=}\{u+\bar{u},\ u\in\mathrm{H}^2(\mathbb{V})\}$, dans lui-même est auto-adjoint. En effet soit $\psi\in\mathrm{H}^2(\mathbb{V})$, $\bar{\psi}\in\overline{\mathrm{H}^2(\mathbb{V})}$, on a

$$\begin{aligned}
&\langle\,\pi_-\,\overline{(1+\mathrm{P}_0)}\,(u+\bar{u})+\pi(1+\mathrm{P}_0)\,(u+\bar{u}),\ \psi+\bar{\psi})\,\rangle\\
&\qquad=\langle\,\pi_-\,\overline{(1+\mathrm{P}_0)}\,(u+\bar{u}),\bar{\psi}\,\rangle+\langle\,\pi(1+\mathrm{P}_0)\,(u+\bar{u}),\ \psi\,\rangle\\
&\qquad=\langle\,u+\bar{u},\ (1+\mathrm{P}_0)\,\bar{\psi}\,\rangle+\langle u+\bar{u},\ \overline{(1+\mathrm{P}_0)}\,\psi\,\rangle\\
&\qquad=\langle\,u+\bar{u},\ \pi(1+\mathrm{P}_0)\,(\psi+\bar{\psi})+\pi_-\,\overline{(1+\mathrm{P}_0)}\,(\psi+\bar{\psi})\,\rangle
\end{aligned}$$

Ce qui montre que l'opérateur ci-dessus est auto-adjoint. D'autre part, on a

$$\begin{aligned}
(\ast)\quad&\|\pi_-\,\overline{(1+\mathrm{P}_0)}\,(u+\bar{u})+\pi(1+\mathrm{P}_0)\,(u+\bar{u})\|^2\\
&\qquad=\|\pi_-\,\overline{(1+\mathrm{P}_0)}\,(u+\bar{u})\|^2+\|\pi(1+\mathrm{P}_0)\,(u+\bar{u})\|^2.
\end{aligned}$$

Par construction, l'expression $(*)$ ci-dessus est égale à

$$(*) \qquad = 2\|\pi(1+P_0)(u+\bar{u})\|^2.$$

Cette norme est minorée d'après l'inégalité (14) par $2m\|u\|^2 = m\|u+\bar{u}\|^2$. L'opérateur $\mathbb{A}$ étant auto-adjoint, cette condition implique qu'il est inversible sur $\mathscr{M}$. Cela signifie que l'équation

$$\pi_- \overline{(1+P_0)}(u+\bar{u}) + \pi(1+P_0)(u+\bar{u}) = \psi \in \overline{H^2(\mathbb{V})} \oplus H^2(\mathbb{V})$$

a une solution unique $u+\bar{u}$, et grâce à l'unicité de la décomposition orthogonale, il s'ensuit que l'équation

$$\pi(1+P_0)(u+\bar{u}) = -\pi(1+P_0)f \in H^2(\mathbb{V})$$

a aussi une solution unique $u+\bar{u}$. Ainsi l'opérateur $\mathbb{A}$ est inversible sur $H^2(\mathbb{V})$ et la fonction $g+\bar{g} = \mathscr{A}^{-1}(-\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)f))$ répond à la question.

Étape 4. — Construction de la fonction d'extension.

Soit donc $h = f+g+\bar{g}$, où g a été obtenue dans l'étape précédente. L'élément h vérifie donc

$$(8) \qquad \forall m \in \Lambda_* \cup \mathbb{V}, \quad \int h(1+P_0)\chi^{-m}\,d\sigma = 0 \qquad \text{et} \qquad \int |1+P_0|^2 h\,d\sigma = \mu^2.$$

(Les propriétés de f et de $g+\bar{g}$ sont transférées à h).

Grâce à cette construction de h, on peut déterminer le polynôme $D_{\mathbb{U}}$ qui va caractériser les extensions positives.

En effet rappelons que $D_{\mathbb{U}} = \pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)(g+\bar{g}) + \pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)f)$.

Ce polynôme va nous permettre d'expliciter le polynôme P_1 qui intervient dans la description de h.

Précisons la forme de la fonction d'extension h.

Nous avons d'abord

$$\begin{aligned}
\pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)h &= \pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)f + \pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)(g\mp g)\\
&= \pi_{\mathbb{R}}(1+P_0)f + \pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)(g+\bar{g}) + \pi_{\mathbb{S}\ \mathbb{V}}(1+P_0)(g+\bar{g}) + \pi_{\mathbb{S}\ \mathbb{V}}(1+P_0)f\\
&= \mu^2 + \pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)(g+g) + \pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)f = \mu^2 + D_{\mathbb{U}}.
\end{aligned}$$

Ces relations sont une conséquence simple des propriétés de h. Comme h est réelle, les relations d'orthogonalité (8) son vérifiées par passage au conjugué, et on a

$$\forall m \in \mathbb{S}\setminus\Lambda', \quad \int |1+P_0|^2 h\chi^{-m}\,d\sigma = \int (1+P_0)h\overline{(1+P_0)}\chi^{-m}\,d\sigma = 0.$$

où $\Lambda' = (\Lambda_\cap \mathbb{S}) + \Lambda_+$ (Λ_+ étant le spectre de $1+P_0$).

On a d'autre part, pour tout $m \in \Lambda'$

$$\int |1+P_0|^2 h\chi^{-m}\,d\sigma = \sum_{k\in\Lambda_+} \overline{(1+P_0)}\,\hat{}\,(k)((1+P_0)h)\,\hat{}\,(m-k).$$

Posons alors

$P_1 \in \mathscr{P}(-\Lambda' \cup \Lambda')$ le polynôme trigonométrique réel dont les coefficients sont

$$\forall m \in \Lambda', \quad \hat{P}_1(m) = \int |1 + P_0|^2 h \chi^{-m} d\sigma.$$

Comme h est réel, par conjuguaison les relations précédentes s'étendent à tout $\mathbb{Z}^d = -\mathbb{S} \cup \mathbb{S}$.

Notons à ce niveau que la technique précédente s'inspire de la démonstration du théorème Helson-Lowdenslager-Szëgo [3].

Déterminons enfin la forme de P_1. On a

$$\forall m \in \mathbb{S}\, \hat{P}_1(m) = \langle \overline{(1+P_0)}(1+P_0) h, \chi^m \rangle = \langle (1+P_0) h, (1+P_0)\chi^m \rangle$$

Comme $(1+P_0)\chi^m \in H^2(\mathbb{S})$, les expressions précédentes sont égales à

$$\langle \pi_{\mathbb{S}}(1+P_0) h, (1+P_0)\chi^m \rangle = \langle D_{\mathbb{U}}, (1+P_0)\chi^m \rangle = \hat{P}_1(m) \qquad (m \in \mathbb{S}).$$

Ceci et ce qui précède implique que $P_1 = \mu^2 + 2\,\mathrm{Re}((1+P_0) D_{\mathbb{U}})$, comme annoncé en (3).

On obtient ainsi $h = P_1/|1+P_0|^2$, p.p., la fonction d'extension annoncée par le théorème.

Il est clair alors que h est une solution du problème d'extension dès que P_1 est positif

Remarque. — Le polynôme P_1 dépend étroitement du polynôme $D_{\mathbb{U}}$ qui aura une part essentielle dont la détermination d'extensions positives et extrémales

Il jouera un rôle « d'obstruction » que l'on précisera plus loin.

II. EXTENSIONS EXTRÉMALES ET NON EXTRÉMALES

Parmi les solutions (éventuelles) du problème d'extensions que l'on obtient, celle qui correspond $P_1 = \mu^2$ (polynôme constant) a une interprétation remarquable et qui nous permettra d'établir le lien avec la théorie de la prédiction de Helson-Szëgo.

Nous noterons h_e cette extension extrémale dans un sens que nous allons préciser. Nous avons ainsi (E_1) : $h_e = \mu^2/|1+P_0|^2$.

PRINCIPE DU « MAXIMUM D'ENTROPIE »

D'après notre construction, l'extension extrémale est obtenue si et seulement si le polynôme d'obstruction $D_{\mathbb{U}}$ est nul. Supposons qu'il en est ainsi. Notons par $\mathscr{F}_\Lambda$ la classe de toutes les extensions φ (positives) répondant au problème (E) posé dans l'introduction et vérifiant la condition $\int \operatorname{Log} \varphi \, d\sigma > 0$. L'extension extrémale h_e est parmi les éléments de $\mathscr{F}_\Lambda$ (qui n'est pas vide puisqu'elle contient au moins h_e), celle qui rend maximale l'intégrale ci-dessus.

En effet :

THÉORÈME 2. — *On suppose toujours* $(1+P_0)^{-1} \in H^\infty(\mathbb{S})$.

(i) *Pour qu'il existe une solution extrémale,* h_e, *au problème d'extension* (E), *de la forme* (E_1), *il faut et il suffit que le polynôme d'obstruction* $D_{\mathbb{U}}$ *soit nul.*

(ii) *L'extension extrémale* h_e, *lorsqu'elle existe, vérifie*

$$\mu^2 = \int \operatorname{Log} h_e \, d\sigma = \max_{\varphi \in \mathscr{F}_\Lambda} \int \operatorname{Log} \varphi \, d\sigma.$$

Preuve. — Nous allons utiliser de manière essentielle un théorème de Helson et Lowdenslager, généralisant un théorème de Szegö [4]

$$\operatorname{Inf} \int |1 - \Sigma \gamma_n \chi^n|^2 \psi \, d\sigma = \exp \int \operatorname{Log} \psi \, d\sigma$$

où $\psi \geqq 0$, ψ et $\operatorname{Log} \psi$ intégrables et où $\Sigma \gamma_n \chi^n$ sont des polynômes trigonométriques dans $H^2(\mathbb{S}_*)$ (avec $\mathscr{S}_* = \mathbb{S} \setminus \{(0, \ldots, 0)\}$).

Par définition de la classe $\mathscr{F}_\Lambda$, on a pour tout $\varphi \in \mathscr{F}_\Lambda$ et tout $P \in \mathscr{P}(\Lambda_*)$.

$$\int |1-P|^2 f \, d\sigma = \int |1-P|^2 \varphi \, d\sigma$$

Comme $\mathscr{P}(\Lambda_*) \subset H^2(S_*)$, il s'ensuit du théorème précédent l'inégalité suivante

$$(E_2) \quad \mu^2 \overset{\text{def}}{=} \inf_{P \in \mathscr{P}(\Lambda_*)} \int |1-P|^2 f \, d\sigma = \inf_{P \in \mathscr{P}(\Lambda_*)} \int |1-P|^2 \varphi \, d\sigma$$
$$\geqq \inf_{Q \in H^2(\mathbb{S}_*)} \int |1-Q|^2 \varphi \, d\sigma = \exp \int \operatorname{Log} \varphi \, d\sigma.$$

Nous avons par ailleurs $\mu^2 = \exp \int \operatorname{Log} h_e \, d\sigma$. En effet, comme $h_e = \mu^2 / |1+P_0|^2$ et que par hypothèse $(1+P_0)^{-1} \in H^\infty(\mathbb{S}_*)$, un théorème de Helson-Lowdenslager ([3], p. 181) affirme que

$$\operatorname{Log} \left| \int (1+P_0) \, d\sigma \right| = \int \operatorname{Log} |1+P_0| \, d\sigma.$$

Comme la valeur moyenne du polynôme $|1+P_0|$ est égale à 1, le premier membre de l'égalité ci-dessus est égal à zéro. Il s'ensuit alors que $\mu^2 = \exp \int \operatorname{Log} h_e \, d\sigma$ et le théorème est prouvé.

1. Entropie maximale

Nous pouvons définir l'entropie grâce au théorème de Helson-Lowdenslager et des inégalités (E_2), établies dans la démonstration du théorème précédent. Soit une suite $(s_k)_{k \in M}$ de type positif (où $M = M_+ - M_+$ et $M_+ \subset \mathbb{S}$, $s_k = \bar{s}_{-k}$). On pose $s = \sum s_k \chi^k$ et on considère l'expression suivante

$$(E_2) \quad \exp(\operatorname{entr}_M(s)) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{P \in \mathscr{P}(M_{+*})} \int |1-P|^2 s \, d\sigma$$
$$= \sum_{(k,\,l) \in M_+ \times M_+} s_k \bar{s}_1 (1-P)\hat{\ }(k-l)$$

On supposera dans la suite que $s_0 = 1$. Le nombre $\operatorname{entr}(s)$ est parfaitement défini et on a $-\infty \leqq \operatorname{entr}(s) \leqq 0$. *On appellera ce nombre entropie de la suite de type positif* (s_k).

L'interprétation géométrique est évidente : la suite $(s_k)_{k \in M}$ induit, dès que la forme quadratique qui apparaît dans l'expression (E_2) est définie positive, une structure euclidienne sur le sous-espace $\mathscr{P}(M_+)$ de polynômes trigonométriques. L'entropie de $(s_k)_{k \in M}$ est le logarithme du cosinus de l'angle que forme le polynôme 1 avec le sous-espace supplémentaire $\mathscr{P}(M_{+*})$. Le lien est d'autre part évident avec la théorie de la prédiction de Helson-Szëgo.

Les fonctions de type positif peuvent représenter les corrélations de processus gaussiens stationnaires indexés par $\mathbb{Z}^d$. Le théorème de Bochner caractérise les fonctions de type positif définies sur tout $\mathbb{Z}^d$ comme étant les transformées de Fourier d'une mesure positive sur $\mathbb{T}^d$.

Ces deux faits nous permettront de transporter toutes les notions liées à l'entropie et définies dans des structures hilbertiennes dans le cadre des processus gaussiens stationnaires indéxés par $\mathbb{Z}^d$.

2. Interprétation du maximum d'entropie dans le cadre de l'extension des fonctions de type positif

On note par $\mathscr{F}_M(s)$ la classe des suites de type positif $(d_k)_{k \in \mathbb{Z}^d}$ (les suites de type positif sont définies dans l'introduction) telle que toute suite de la classe vérifie : $\forall k \in M \; d_k = s_k$.

Le théorème de Calderòn-Rudin [1] et [5] affirme que la classe $\mathscr{F}_M(s)$ peut être vide, pour $d \geqq 2$.

On ne sait pas caractériser les suites $s=(s_k)_{k \in M}$, $(M \neq \mathbb{Z}^d)$, telles que $\mathcal{F}_M(s)=\varnothing$.

Dans le cas où $\mathcal{F}_M(s) \neq \varnothing$, se pose alors le problème de l'unicité ou de la non-unicité de l'extension. Dans un article datant de 1959 [3], A. Devinatz propose une condition suffisante assurant l'unicité de l'extension dans le cadre ci-dessus (et aussi dans le cadre du groupe continu $\mathbb{R}^2$).

Il est remarquable, dans le cas de $\mathbb{Z}^2$ et $M=\{(i, j) \in \mathbb{Z}^2, 0 \leqq i, j \leqq n\}$), que l'unicité se traduise par le caractère singulier des matrices de Tœplitz $T_{M_i}(s)=(s_{k-l})_{(k, l) \in M_i \times M_i}$, $i=1, 2$, où $M_1=\{(j, 0), 0 \leqq j \leqq n\}$ et $M_2=\{(0, j), 0 \leqq j \leqq n\}$. Ce n'est cependant qu'une condition suffisante. Lorsque la matrice est inversible l'extension n'existe pas ou n'est pas unique. Le travail précédent montre alors que si le polynôme P_1 (explicite) est positif alors l'extension est possible et la méthode fournit un élément explicite de $\mathcal{F}_M(s)$.

Ce commentaire étant fait, revenons à la notion d'entropie. On peut interpréter les relations (E_2) par l'algèbre linéaire. Lorsque la forme quadratique induite par $s=(s_k)_{k \in M}$ est définie positive, on a $\exp(\text{ent}_M(s))=\det T_{M+}/\det T_{M+*}$. En termes de prédiction linéaire, on dit que l'on a une prédiction parfaite.

Dans le cas de non-unicité de l'extension chaque élément $h=(h_k) \mathcal{F}_M(s)$ a une entropie $\text{ent}(h)$. Par définition même de l'entropie on a $\forall h \in \mathcal{F}_M(s)$, $\text{ent}(h) \leqq \text{ent}_M(s)$.

Remarquons que $s=(s_k)_{k \in M}$ n'appartient pas à $\mathcal{F}_M(s)$ si $M \neq \mathbb{Z}^d$, mais permet seulement de définir cette classe.

Dans le cas $d=1$, d'après le théorème 2 ci-dessus et un théorème de G. Szëgo qui affirme que le polynôme $1+P_0$ ne s'annule pas sur $\mathbb{T}$, il existe un élément h_0 de $\mathcal{F}_M(s)$ tel que $\text{ent}_M(s)=\text{ent}(h_0)=\max_{h \in \mathcal{F}_M(s)} (\text{ent}(h))$.

On dit alors que h_0 réalise le maximum d'entropie. Remarquons, en passant à la forme duale par la transformation de Fourier, que l'on a

$$\hat{h}_0=\exp(\text{ent}(s))/|1+P_0|^2.$$

Lien avec le théorème de Szëgo-Kolmogorov-Krein

Soit $\mu(h)$ la mesure positive sur le tore $\mathbb{T}$ dont les coefficients de Fourier $(\mu(h))\hat{}(k)=h_k$ (théorème de Bochner). D'après un théorème classique des trois auteurs cités ci-dessus, on a $\text{entr}(h)=\int \text{Log}\, \mu'(h)\, d\sigma$ où $\mu'(h)$ est la partie absolument continue (par rapport à la mesure de Lebesgue), de la mesure $\mu(h)$. Par le biais de ce théorème on peut donner une interprétation du maximum d'entropie en termes de prédiction linéaire. En effet la quantité $\exp(\mathrm{ent}(h))$ est l'erreur de prédiction lorsque on approche le polynôme 1 par sa projection sur le sous-espace $(\mathrm{H}^2_{\mu(h)})(\mathbb{S}_*)$.

Ainsi parmi les mesures $\mu(h)$, $h \in \mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$, celle qui réalise l'erreur de prédiction la plus grande est la mesure $\mu(h_0)$ de densité $\hat{h}_0$ définie ci-dessus. Dans le cas d'indétermination, choisir h_0 à l'aide du maximum d'entropie dans la classe $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$, consiste à prendre la mesure qui réalise la « pire » prédiction, ou encore celle qui introduit le moins d'informations.

Autres interprétations de l'entropie

Il y a d'autres interprétations possibles, par exemple le caractère markovien du processus gaussien sous-jacent. Nous n'aborderons pas cet aspect des choses dans ce travail. Le lecteur désireux d'approfondir la question se reportera à [13].

Le fondement probabiliste du choix de l'entropie précédente est établi dans un article de J. Chover [11], 1961.

L'utilisation de la technique du maximum d'entropie par le géophysicien J. P. Burg [9] en Théorie du Signal (stationnaire) s'est révélée très féconde pour la synthèse (ou la reconstruction) de densités spectrales. On se reportera aussi au dernier travail de D. Z. Arov et de M. G. Krein [8].

Approximation par maximum d'entropie

Choisir un élément h_1 de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ consiste à approcher le « vrai » élément $h_v \in \mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ dont on ne connaît que les composantes en nombre fini $(h_{v,k})_{k \in \mathrm{M}} = (s_k)_{k \in \mathrm{M}}$. Soit δ un écart défini sur $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ et « diam » le diamètre de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ défini par $\mathrm{diam}(\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)) = \max\limits_{h, h' \in \mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)} (\delta(h, h'))$. La qualité de l'approximation, *relativement à l'écart* δ, d'un élément h_v de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ par un élément h_1 de la même classe, en observant que

$$0 \leqq \delta(h, h') \leqq \mathrm{diam}(\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s))$$

dépendra donc de la « taille », relativement à l'écart δ, de la classe $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$. Ce qui vient d'être décrit ci-dessus correspond à un principe de reconstruction dans le cas d'indétermination (on dit aussi ambiguïté en cristallographie) suivi d'une estimation de la qualité de l'approximation.

L'état des choses

La notion d'approximation d'une densité positive f (de probabilité ou de densité spectrale) par une densité positive obtenue en maximisant l'entropie $-\int p \log p \, d\sigma$, où p parcourt

$$\mathscr{E}_n(f)=\left\{p \geqq 0, \int p \, d\sigma<\infty,-\int p \operatorname{Log} p \, d\sigma<\infty, \forall k,\ -n \leqq k \leqq n, \hat{p}(k)=\hat{f}(k)\right\}$$

a été proposée par D. Dacunha-Castelle.

Son élève E. Gassiat [12] a établi, dans le cadre ci-dessus des inégalités intéressantes et surtout a mis en évidence, par des simulations numériques l'excellente qualité sommatoire par maximum d'entropie comparée à celle obtenue à l'aide de noyaux classiques tels que le noyau de Féjer, etc., lorsque $(\hat{f}(k))_{k \in \mathrm{M}}$, $\mathrm{M}=[-n\, n]$, (la dimension est toujours $d=1$) sont les coefficients d'une densité de probabilité f présentant des « pics » très prononcés (proche d'une combinaison de mesures de Dirac).

D. Dacunha-Castelle m'a alors proposé de réfléchir à ce phénomène. Tous les efforts faits en ce sens n'ont permis que l'amélioration des inégalités de E. Grassiat et le phénomène est resté encore inexpliqué.

Le problème de l'extension effective des fonctions de type positif m'a convaincu qu'un autre « angle d'attaque » était nécessaire. L'idée à retenir est que, dans le cadre qui nous intéresse, la qualité de l'approximation est due plus à la « taille » de la classe $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$, qui est définie de manière plus générale et plus intrinsèque que la classe $\mathscr{E}_{\mathrm{M}}(s)$, que la propriété particulière de telle ou telle fonctionnelle d'entropie définie sur les éléments des classes considérées. Nous reviendrons cependant sur le sens du choix d'une fonctionnelle d'entropie donnée à la lumière de récents résultats [2].

Pour mesurer la « taille » de la classe des extensions (non réduite à un point), il est nécessaire d'introduire un écart, lié éventuellement à la fonctionnelle d'entropie, pour rendre les calculs effectifs. Grâce aux résultats de A. Devinatz [3] concernant l'unicité de l'extension, (on a une condition nécessaire et suffisante dans le cas $d=1$, et une condition suffisante dans le cas $d>1$) et la mise en place de la notion d'entropie ci-dessus, on définit un écart sur $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$, dans le cas $d=1$, $(\mathrm{M}=[-n, n])$, par

$$\forall (h, h') \in \mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s) \times \mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s), \quad \delta(h, h')=|\exp(\operatorname{ent}(h)-\exp(\operatorname{ent}(h')|$$

On a ainsi un encadrement du diamètre de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$

$$0 \leqq \operatorname{diam}(\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)) \leqq \exp(\operatorname{entr}(s))=\det \mathrm{T}_{\mathrm{M}+}(s)/\det \mathrm{T}_{\mathrm{M}+*}(s) \leqq 1.$$

Le rapport des déterminants est obtenu (numériquement) comme l'élément $a_{0,0)}$ de la matrice $(\mathrm{T}_{\mathrm{M}+}(s))^{-1}=(a_{m,n})_{(m,n) \in \mathrm{M}+\times \mathrm{M}+}$. Nous constatons que cette définition est parfaitement cohérente avec le cas particulier où la classe $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ est consitutée d'un seul élément, *i.e.* une extension unique. En effet, d'après le résultat évoqué ci-dessus (Lemme 5.1, p. 125 [3]) nous avons $\det \mathrm{T}_{\mathrm{M}+}=0$ si et seulement si l'extension est unique. On a alors dans ce cas

$$\operatorname{diam}(\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s))=\exp(\operatorname{ent}_{\mathrm{M}}(s))=0.$$

Le diamètre de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ sera « petit », et donc l'approximation « bonne », dans deux cas (ou la combinaison des deux). Le premier cas consiste en une suite $s=(s_k)_{k \in \mathrm{M}}$, dont les termes s_k constituent les coefficients de Fourier d'une densité positive assez régulière, nous obtenons une estimation de l'écart $\delta(f, h_n)$, où h_n est l'élément de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ réalisant le maximum d'entropie dans la classe (la dimension d est égale à 1). La qualité de l'approximation augmentera en fonction de la croissance du cardinal de M. On observera dans ce cas que les coefficients de la densité f convergent (assez vite) vers zéro (*voir* [7]).

Le deuxième cas où l'approximation est « bonne » est celui où le diamètre de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ est « petit » du fait que $\exp(\mathrm{ent}_{\mathrm{M}}(s))$ est petit. Ceci caractérise les transformées de Fourier de mesures « proches » de mesures singulières. Dans ce cas les coefficients de Fourier tendent très lentement vers zéro.

Dans le cas $d=2$, un autre résultat d'A. Devinatz (Théorème 1′, p. 111 [3]), donne la condition suivante :

Soit $s=(s_{k,l})_{(k,l) \in \mathrm{M}}$, la suite de type positif indexée par

$$\mathrm{M}=\{(k, l),\ - \leqq k \leqq m,\ -n \leqq l \leqq n>\}$$

et $\mathrm{M}(1)=[-m, m] \times \{0\}$, $\mathrm{M}(2)=\{0\} \times [-n, n]$. On suppose que les suites $s(1)=(s_{k,0})_{(k,0) \in \mathrm{M}(1)}$ et $s(2)=(s_{0,1})_{(0,1) \in \mathrm{M}(2)}$, admettent chacune une extension unique, alors la suite $s=(s_{k,l})_{(k,l) \in \mathrm{M}}$ admet une extension unique.

En se basant sur ce dernier résultat, on peut définir un « écart » δ qui prendra en compte les entropies des « sections » $s(1)$ et $s(2)$ de la suite s.

Il est cependant nécessaire, pour confirmer cette analyse, de mesurer la proximité de deux éléments de $\mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s)$ en introduisant une norme sur leurs coefficients (ceux qui sont indexés par $\mathbb{Z} \setminus \mathrm{M}$), par exemple

$$\forall (h, h') \in \mathscr{F}_{\mathrm{M}}(s) \times \mathscr{F}_{M}(s), \quad \| h-h' \|_{\infty} = \sup_{k \in \mathbb{Z}} | h_k - h'_k |.$$

On estimera alors cette norme en fonction de $\exp(\mathrm{ent}_{\mathrm{M}}(s))$.
Nous espérons établir des résultats dans ce sens prochainement.

Choix de l'entropie en fonction du type de contraintes *a priori*

D. Dacunha-Castelle et F. Gamboa ont montré, dans un travail récent [2] dans un cadre plus général, que la prise en compte de contraintes *a priori* dans un problème de reconstruction de densités physiques, pouvait déterminer le choix d'une fonctionnelle d'entropie. Ceci apporte un éclairage décisif dans le débat qui agite tous les auteurs concernés par l'utilisation du maximum d'entropie.

L'autre aspect important dans ce travail est la possibilité de proposer des fonctionnelles d'entropie dans le cas où les contraintes sont non linéaires.

La jonction avec l'idée que la qualité de l'approximation dépend de la taille s'établit par le constat simple que toute contrainte (ou information) supplémentaire à pour effet de réduire la classe des extensions retenues et par là même la « taille » de la classe. Le principal problème (pour les applications) est la construction effective d'une extension au moins.

Les commentaires qui viennent d'être faits sur le principe du maximum d'entropie, aussi bien sur les questions mathématiques qu'il soulève n'ont pas encore de réponses complètement satisfaisantes, sont motivés par la très grande importance prise par l'application de ce principe dans les problèmes de reconstruction. On peut signaler des applications en cristallographie ([10], [5]), en Physique, en Théorie du Signal et en Image.

Le résultat que nous proposons, dans le contexte précis décrit dans l'introduction, nous permettront de décrire (lorsque cela est possible) toute une famille paramétrée d'extensions. Ce qui pourrait faire avancer le problème des phases en cristallographie où les contraintes sur les coefficients ne sont pas linéaires.

Revenons au résultat principal de ce travail et à ses conséquences.

VERS LES APPLICATIONS : extensions non extrémales

Soit $\Lambda=\Lambda(1)\cup\Lambda(2)$ la partie finie de $\mathbb{Z}^d$ introduite au début de l'article. Les coefficients qui définissent la fonction de type positif sont répartis en deux sous-ensembles. Dans le premier les c_k, $k\in\Lambda(1)$ sont connus, dans le second les $c_k=c_k(t)$, $k\in\Lambda(2)$ dépendent d'un paramètre t. Il s'agit de construire des extensions appartenant à $\mathscr{F}_\Lambda$ en faisant varier le paramètre t (qui selon les données du problème varie dans un certain ensemble).

Voici deux conséquences du théorème 1.

Extensions paramétrées

On note par $D_{\mathbb{U},t}$ le polynôme d'obstruction défini dans la démonstration du théorème 1. Soit $P_{1,t}=F(D_{\mathbb{U},t})$ le polynôme qui intervient dans l'expression de l'extension du théorème 1 (F est la fonction qui permet de construire $P_{1,t}$ à l'aide de $D_{\mathbb{U},t}$).

COROLLAIRE 1. — (i) (*Soit* $\mathscr{I}_{\Lambda(1)}$ *l'ensemble des indices* $t=(t_k)_{k\in\Lambda(2)}$, *défini par les inégalités suivantes*

$$|1+P_{0,t}|>0 \qquad et \qquad P_{1,t}\geqq 0.$$

Alors l'ensemble $\mathscr{G}=\{P_{1,t}/|1+P_{0,t}|,\ t\in\mathscr{I}_{\Lambda(2)}\}$, *constitue une famille d'extensions paramétrées de la fonction de type positif définie par la famille* $(c_k)_{k\in\Lambda(1)\cup\Lambda(2)}$.

(ii) (*a*) *Soit* $\mathscr{J} = \{ t \in \mathscr{I} / \mathrm{D}_{\mathrm{U},t} = 0 \}$. *Les extensions extrémales sont alors obtenues pour* $t \in \mathscr{J}$ *et ont pour expression*

$$h_{e,t} = \mu_t^2 / |1 + \mathrm{P}_{0,t}|^2.$$

où μ_t *est une constante qui ne dépend que des données.*

(*b*) *L'enveloppe convexe de* $\mathscr{G}$ *constitue aussi une famille d'extensions.*

Lien avec le problème des phases en cristallographie

En cristallographie, dans une modélisation simplifiée, le problème des phases se formule exactement de la même manière.

Une densité électronique qui sera une estimée de la « vraie » densité appartient à $\mathscr{F}_{\Lambda(1) \cup \Lambda(2)}$, où $(c_k)_{k \in \Lambda(1)}$, sont les coefficients de Fourier (de la densité électronique) connus $(c_m = |c_m| e^{im\varphi})_{m \in \Lambda(2)}$, dont on ne connaît que les modules (les phases sont inconnues).

On note par ρ la densité électronique à estimer. On pose comme précédemment $\Lambda = \Lambda(1) \cup \Lambda(2)$, et soit $(\hat{\rho}(k))_{k \in \Lambda}$, les coefficients de Fourier relatifs à la partie finie Λ. Ils définissent une fonction de type positif. On obtient en reécrivant le corollaire précédent :

COROLLAIRE 2. — *Soit* $\hat{\rho}(k)$, $k \in \Lambda$, *les coefficients de Fourier de* ρ. *On suppose connus les coefficients indexés par* $k \in \Lambda(1)$. *On écrit* $(\hat{\rho}(k) = |\hat{\rho}(k)| e^{i\varphi_k})_{k \in \Lambda(2)}$. *On suppose connus les modules* $|\hat{\rho}(k)|$, *mais pas les phases* φ_k. *Alors si les conditions suffisantes du corollaire précédent sont satisfaites, les extensions fournies par ce corollaire constituent, lorsqu'on remplace* $(c_k)_{k \in \Lambda}$ *par* $(\hat{\rho}(k)_{k \in \Lambda}$ *et* $t = (t_k)_{k \in \Lambda(2)}$ *par les phases* $(\varphi_k)_{k \in \Lambda(2)}$, *des extensions de densité electronique qui seront autant d'estimées de cette densité.*

Exemples d'extensions de fonctions de type positif

Nous donnons, dans le chapitre suivant, une série complète et variée d'exemples illustrant les résultats établis ci-dessus.

Il faut cependant souligner que ces calculs ne peuvent être faits qu'à l'aide du théorème précédent.

Ces exemples, traités à la main, montrent qu'il est possible de calculer explicitement les solutions. Deux systèmes linéaires, l'un de dimension finie, l'autre de dimension infinie, dépendant de paramètres suffisent à déterminer les extensions cherchées. Nous donnerons dans la partie III des détails sur leur (remarquable) structure.

III. EXEMPLES D'EXTENSIONS DE FONCTIONS DE TYPE POSITIF

On considère des fonctions de type positif définies sur une partie (finie) $\Lambda = \Lambda_+ - \Lambda_+$ où Λ_+ est une partie (finie) de $\mathbb{Z}^2$. Cela correspond, rappelons-le, à la donnée d'une suite de nombres complexes $(c_{m,n})$ où $(m, n) \in \Lambda$, telle que pour toute suite $(a_{k,l})$, $(k, l) \in \Lambda_+$, de nombres complexes, on ait

$$\sum a_{k,l} \bar{a}_{k',l'} c_{l-l',k-k'} \geqq 0, \tag{1}$$

dans la somme ci-dessus $((k, l), (k', l'))$ parcourt $\Lambda_+ \times \Lambda_+$

Soit $T_{\Lambda'} = (c_{m-m',n-n'})_{((m,n),(m',n')) \in \Lambda' \times \Lambda'}$ où $\Lambda' \subset \Lambda_+$, la matrice de Tœplitz associée à Λ' et à la suite donnée $(c_{m,n})$.

Une condition nécessaire et suffisante pour réaliser (1) est que $\det T_{\Lambda'} \geqq 0$ pour toute partie $\Lambda' \subset \Lambda_+$ (théorème de Herglotz 1911).

APPLICATION DU THÉORÈME D'EXTENSION

La détermination pratique de la famille d'extensions paramétrées nécessite la résolution de deux systèmes linéaires dépendant de paramètres. Le premier système qui permet de déterminer le polynôme P_0, est d'ordre $(\mathrm{card}(M_+))^2$, et de structure particulière (de Tœplitz). Le second système linéaire qui sert à déterminer le polynôme P_1 est un système linéaire infini. On constate cependant que ce système présente une caractéristique remarquable, celle d'avoir une structure de blocs-Tœplitz. C'est une situation qui est favorable pour notre objectif, car la résolution de tels systèmes infinis revient à la factorisation d'une fonction définie sur le tore $\mathbb{T}$ et à valeur des matrices carrées. Ces problèmes ont déjà fait l'objet de travaux et des solutions complètes sont établies.

Voici cependant quelques exemples traités « à la main ».

Soit $\Lambda_+ = \{(0, 0), (1, 0), (0, 1)\}$. On a alors $\Lambda = \{(-1, 1), (0, 1), (-1, 0), (0, 0), (1, 0), (0, 1), (1, -1)\}$.

Le but de ce qui suit est de construire une extension de (1) sous la forme d'une suite $(\mathbf{d}_{k,l})$ vérifiant la même relation que (1), mais pour des indices (k, l) variant dans $\mathbb{Z}^2$ tout entier et satisfaisant à la contrainte

$$\mathbf{c}_{k,l} = \mathbf{d}_{k,l}, \qquad \forall (k, l) \in \Lambda. \tag{2}$$

PRÉSENTATION DE L'EXEMPLE NUMÉRIQUE

Nous suivrons la démarche de la démonstration du théorème.

Étape 1. — Détermination du polynôme extrémal.

Les données sont $\mathbf{c}_{0,0}=1$, $\mathbf{c}_{1,0}=\mathbf{c}_{0,1}=\mathbf{c}_{-1,0}=\mathbf{c}_{0,-1}=\alpha$, $\mathbf{c}_{1,-1}=\mathbf{c}_{1,-1}=\beta$. Soit T_Λ la matrice de Tœplitz associée à cette suite

$$T_\Lambda=\begin{pmatrix}1 & \alpha & \alpha\\ \alpha & 1 & \beta\\ \alpha & \beta & 1\end{pmatrix}.$$

Les conditions de positivité de la forme définie par (1) sont

$$1-\alpha^2\geqq 0; \qquad 1-\beta^2\geqq 0; \qquad (1-\beta).(1+\beta-2\alpha^2)\geqq 0.$$

Les coefficients du polynôme extrémal sont donnés par

$$T_\Lambda^{-1}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=\mu^{-2}\begin{pmatrix}1\\a\\a\end{pmatrix}$$

avec

$$\mu^2=(1+\beta-2\alpha^2)/(1+\beta) \qquad \text{et} \qquad a=-\alpha/(1+\beta)$$

et le polynôme est $1+P_0=1+ae^{i\theta_1}+ae^{i\theta_2}$.

Étape 2. — Construction du polynôme $h=P_\Lambda/|1+P_0|^2$, dont la propriété est d'avoir des coefficients de Fourier égaux à $\mathbf{c}_{k,l}$ lorsque $(k,l)\in\Lambda$, h est réel, mais non nécessairement positif (il ne répond pas au problème pour le moment).

On note par π_L le projecteur orthogonal de $L^2(\mathbb{T}^2)$ sur le sous-espace engendré par les exponentielles $\chi_1^k\chi_2^1$ où $(k,l)\in L\subset\mathbb{Z}^2$. On peut définir le « demi-plan » $\mathbb{S}$ de $\mathbb{Z}^2$ par la relation $\{(m,n)\in\mathbb{S}$ équivaut à $(m,n)=(0,0)$ ou (m,n) vérifie $\mu m+vm>0$, avec u/v irrationnel très proche de zéro$\}$.

Posons $\tilde\Lambda=(\mathbb{S}\cap\Lambda)\diagdown\Lambda$, $\mathbb{U}=\tilde\Lambda\diagdown\Lambda_+$, $\mathbb{V}=\mathbb{S}\diagdown\tilde\Lambda$.

Calcul de $D_{\mathbb{U}}=\pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)(p+\bar p)+\pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)f$.

p est la solution de (1) $\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)(p+\bar p)=-\pi_{\mathbb{V}}(1+P_0)f$.

Posons $p=\sum\gamma_{k,l}\chi_1^k\chi_2^l$, $(k,l)\in\mathbb{V}$. L'existence de p est prouvé dans le théorème. On a

$$(2)\quad \pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)(p+\bar p)=\sum(\gamma_{m,n}+a\gamma_{m-1,n}+a\gamma_{m,n-1} +\bar\gamma_{-m,-n}+a\bar\gamma_{-m+1,-n}+a\gamma_{-m,-n+1})\chi_1^m\chi_2^n$$

où $(m,n)\in\mathbb{S}$

Comme dans l'exemple $\mathbb{U}=\{(1,-1)\}$, on obtient

$$\pi_{\mathbb{U}}(1+P_0)(p+\bar p)\hat{\ }(1,-1)=a\gamma_{1,-2}$$

Calcul de $\pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)f$.

On a

$$\pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)f=1+2a\alpha+\beta+a\alpha+(\beta+a\alpha)\chi_1\bar\chi_2 +a\alpha\chi_1\chi_2+a\alpha\chi_1^2+a\alpha\chi_2^2+a\beta\chi_1^2\bar\chi_2.$$

On vérifie aisément que les coefficients (égaux à $\alpha+a+\alpha\beta$) de χ_1 et χ_2 sont nuls, ce qui est attendu grâce à la construction de $1+P_0$.

Les deux calculs précédents nous permettent d'écrire

$$D_{\mathbb{U}}\hat{}\,(1, -1) = a\gamma_{1,-2} + \beta + a\alpha,$$

on pose alors

$$d = d(\alpha, \beta) = D_{\mathbb{U}}\hat{}\,(1, -1).$$

Calcul du polynôme P_1

D'après la démonstration du théorème, on a :

$$\hat{P}_1(m, n) = \int h\,|1 + P_0|^2 \chi^{-m} \chi^{-n}\, d\sigma$$

Or par construction, on a $\forall (m, n) \in \mathbb{S}$,

$$D_{\mathbb{U}}\hat{}\,(m, n) = (h(1 + P_0))\hat{}\,(m, n)$$

Comme d'autre part P_1 est réel, on a

$$P_1(\theta_1, \theta_2) = \mu^2 + 2d\cos(\theta_1 - \theta_2) + 2ad\cos(\theta_1 - 2\theta_2)$$

On a ainsi explicitement la fonction $h = P_1/|1 + P_0|^2$ annoncée par le théorème.

CONDITIONS SUFFISANTES D'EXTENSION

Remarquons que a est une fonction de α et β et que $\gamma_{1,-2}$ s'obtient grâce au système linéaire décrit plus haut. On reviendra sur la détermination pratique de ce coefficient.

Extention extrémale

La condition nécessaire et suffisante (ou relation d'obstruction) pour que h soit solution du problème du maximum d'entropie décrit plus haut, en particulier $h \in \mathscr{F}_\Lambda$, c'est-à-dire constitue une extension de type positif définie sur tout $\mathbb{Z}^2$, est

$$(0) \quad d = d(\alpha, \beta) = a\gamma_{1,-2} + \beta + a\alpha$$
$$= (-\alpha/(1+\beta))\gamma_{1,-2} + \beta - (\alpha^2/(1+\beta)) = 0.$$

Comme $\gamma_{1,-2}$ est obtenue en fonction de α et β (précisé plus loin) cette relation nous donne, en tenant compte des contraintes pour assurer la forme définie ci-dessus, les paramètres α, β qui répondent au problème.

Avant de préciser un peu plus les paramètres, nous faisons une remarque dans ce qui suit.

Extension non extrémale

La relation $d(\alpha, \beta)=0$ nous assure une construction optimale dans le problème d'extension posé plus haut. On peut cependant obtenir une famille paramétrée d'extensions dès que, dans l'expression de h, le polynôme P_1 est positif. Cela est possible lorsque $d(\alpha, \beta)$ est proche de zéro, c'est-à-dire dans le « voisinage » de la condition d'obstruction.

Ainsi dans le cas extrémal précédent α, β sont choisis sur la courbe $d(\alpha, \beta)=0$ (limitée par les contraintes établies au début du chapitre).

Détermination pratique des coefficients d'extension

En principe le système linéaire (2) ci-dessus permet de déterminer tous les coefficients $\gamma_{k,l}$ de p (ou de h à partir d'un certain rang). La relation d'obstruction ne nécessite qu'un nombre fini de coefficients $\gamma_{k,l}$, ceux indexés par $\tilde{\Lambda}\setminus\Lambda_+$, et dans notre exemple un seul point. Remarquons que, bien que tout le système ne soit pas nécessaire (seuls les indices proches de la frontière de $\mathbb{S}$ interviennent), le sous-système linéaire est de dimension infinie

$$\gamma_{0,l}+a\gamma_{1,-l}+a\gamma_{0,l-1}=-(\pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)f)\hat{}\,(0,1), \quad l\geqq 2$$
$$\gamma_{1,-k}+a\gamma_{0,k}+a\gamma_{1,-k-1}=-(\pi_{\mathbb{S}}(1+P_0)f)\hat{}\,(1,-k), \quad k\geqq 1$$

Cependant la structure particulière de l'exemple nous permet d'obtenir exactement le terme cherché $\gamma_{1,-2}$.

En effet le système ci-dessus revient à résoudre le système suivant

$$\begin{gathered} X_0+aX_1=-a\alpha \\ aX_0+X_1+aX_2=0 \\ aX_1+X_2+aX_3=0 \\ \dots\dots\dots\dots=0 \\ aX_{n-1}+X_n+aX_{n+1}=0 \\ \dots\dots\dots\dots=0 \end{gathered}$$

C'est une structure de matrice de Tœplitz infinie que l'on sait classiquement résoudre.

Remarque importante

La structure du système linéaire infini ci-dessus est connu sous le nom de système Bloc-Tœplitz dont la résolution se ramène à la factorisation d'une fonction matricielle.

Dans notre cas cela se ramène à la factorisation d'une fonction scalaire $f(e^{i\theta})=ae^{-i\theta}+1+ae^{i\theta}$.

Revenons aux calculs.

Dans ce système $X_0=\gamma_{0,2}$ et $X_1=\gamma_{1,-2}$ le coefficient cherché. On remarquera que pour établir la relation (0), nous n'aurons besoin que de X_0, en effet, on a

$$d(\alpha, \beta)=a\gamma_{1,-2}+\beta+a\alpha=aX_1+a\alpha+\beta=\beta-X_0$$

et $X_0=-(1/2)\alpha(1-(1-4a^2)^{1/2}$, comme $a=-\alpha/(1+\beta)$.
La relation d'obstruction est particulièrement simple

$$d(\alpha, \beta)=0 \quad \text{équivaut à} \quad \beta-\alpha^2=0.$$

Nous pouvons construire avec cette relation tous les exemples que nous souhaitons, pour peu que les paramètres α et β vérifient les conditions imposées au début.

Procédure de calcul

Exemple 1. — Soit $\alpha=.5$, donc $\beta=.25$ vérifie la conditon d'obstruction (0). La fonction extrémale h du théorème est égale à

$$h=(3/5)/(1.32-.8\cos(\theta_1)-.8\cos(\theta_2)+.32\cos(\theta_1-\theta_2).$$

Un petit programme (sur micro) permet de donner les coefficients de h suivants

$$\hat{h}(1.1)=.99989\simeq 1; \qquad \hat{h}(0, 1)=.501\approx 1/2=\alpha;$$
$$\hat{h}(1.0)=.49999\simeq\alpha;$$
$$\hat{h}(0.2)=.250=1/4; \qquad \hat{h}(1.-1)=.250=1/4=\beta.$$

Exemple 2 (contre-exemple). — On prend toujours $\alpha=.5$ mais $\beta=.3$ ne vérifie pas la relation d'obstruction (0).

La fonction

$$h=\mu^2/Q=.6153/(1+2a^2+2a\cos\theta_1+2a\cos\theta_2+2a^2\cos(\theta_1-\theta_2))$$

où $a=-.3846$, a pour coefficients de Fourier $\hat{h}(0.0)=.963$ (au lieu de 1); $\hat{h}(0.1)=\hat{h}(1.0)=.454$ (au lieu de .5) et ne constitue pas une extension cherchée. Remarquons que dans le cas de $\mathbb{Z}$, de telles fonctions répondent au problème d'extension. Le problème multidimensionnel est d'une nature beaucoup plus complexe.

Exemple 3. — Les paramètres α, β, a sont les mêmes que dans l'exemple précédent. La fonction P_1/Q est telle que P_1 est positif (Q est positif par construction, dont l'expression est donnée dans l'exemple 2). On a

$$P_1=.6153+.261\cos(\theta_1-\theta_2)-.1005\cos(\theta_1-\theta_2).$$

Les coefficients de Fourier de P_1/Q sont

$$\hat{h}(0, 0)=.99989\simeq 1, \hat{h}(1, 0)=\hat{h}(0, 1)=.501\simeq 1/2=\alpha;$$
$$\hat{h}(1, -1)=.3007\approx .3=\beta; \hat{h}(0, 2)=.235; \hat{h}(1.-2)=.110; \text{ etc.}$$

La fonction ci-dessus a des coefficients qui ne vérifient pas la condition d'obstruction (0) (elle n'est pas extrémale), mais répond néanmoins au problème d'extension de fonction de type positif défini ci-dessus, car elle répond à la condition suffisante d'extension au sens large définie ci-dessus.

Exemple 4. — Dans cet exemple nous prenons $\alpha=.8$, $\beta=.9$.

Les calculs montrent que la fonction P_1/Q définie comme précédemment a des coefficients de Fourier, ceux indéxés par Λ sont égaux respectivement à 1, α, α, β, mais que :

$$P_1=-.3263+.92\cos(\theta_1-\theta_2)-.389\cos(\theta_1-2\theta_2)$$

n'est pas positif, et ne répond donc pas au problème de l'extension.

Exemple 5. — Dans cet exemple on prend $\alpha=.9$, $\beta=.8$, on obtient $a=-.5$. Le polynôme $1+P_0$ peut s'annuler. On se trouve au bord du domaine de validité des conditions suffisantes énoncées dans le théorème.

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier D. Dacunha-Castelle pour les nombreuses discussions portant sur le maximum d'entropie.

Mes remerciements vont aussi au rapporteur de cet article pour les indications concernant la forme de la rédaction.

RÉFÉRENCES

I. Extension de fonction de type positif.

[1] A. Caldéron et R. Pepinsky, *On the Phases of Fourier Coefficients for Positive Real Periodic Function*, in *Computing Methods and the Phase Problem in X-Ray Crystal Analysis*, p. 339-346, Ray Pepinsky Editor, 1950.

[2] D. Dacunha-Castelle et F. Gamboa, *Méthodes du maximum d'entropie et contraintes non linéaires*, Prépublication de l'université de Paris-Sud, 1988, Mathématiques, 91405 Orsay France.

[3] A. Devinatz, On the extensions of Positive Definite Functions, *Acta math.*, 1959, p. 109-134.

[4] H. Helson et D. Lowdenslager, Prédiction theory and Fourier Series in Several variables, *Acta math.*, 1958, p. 165-202.

[5] J. Navaza, The Use of the Non Local Constaints in Maximum Entropy Electron Density Reconstruction, *Acta Cryst.*, 1986, vol. **A42**, p. 212-213.

[6] W. Rudin, The Extension Problem of Positive Definite Function, Illinois *J. Math.*, vol. 7, 1963, p. 532-539.

[7] A. Seghier, Reconstruction de la densité spectrale par maximum d'entropie. Cas *d*-dimensionnel, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. **305**, série I, 1987, p. 517-520.

II. Principe du maximum d'entropie.

[8] D. Z. Arov et M. G. Krein, On Computation of Entropy and their Minimum, *Acta. Sci. Math.*, vol. **45**, 1983, p. 35-50.

[9] J. P. BURG, Maximum Entropy Spectral Analysis, *Ph. D. Thesis*, Dept. of Geophysics, Standford University, California, 1975.

[10] D. DACUNHA-CASTELLE, Reconstruction des phases en cristallographie par maximum d'entropie (d'après G. Bricogne), *Séminaire Bourbaki* 36^e *année*, 1983-1984, n° 628.

[11] J. CHOVER, On Normalized of the Extensions of the Positive Definite Function, *J. Math. Mec.*, 10, n° 6, 1961, p. 927-945.

[12] E. GASSIAT, Problème sommatoire par maximum d'entropie, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. **303**, série I, n° 14, 1986.

[13] H. KÜNSCH, Thermodynamics and Statistical Analysis of Gaussians Random Field *Z. Wahrsh. verw. Gebeite*, vol. **58**, 1981, 407-421.

[14] A. MOKKADEM, Entropie de processus et erreur de prédiction, *C. R. Acad. Sic. Paris*, t. **298**, série I, n° 19, 1984.

(*Manuscrit reçu le* 2 *novembre* 1989
révisé le 10 *octobre* 1990.)