这里从理论上给出 QR 分解的算法复杂度。由于我们只关心领头阶的贡献，故下述讨论中均记 $(n-\text{const.})\sim n$; 例如，对行、列指标的求和有时只有 $(n-1)$ 项，但为简单起见，下面统一写为 $\sum^n$. 此外，假定加减、乘除对运算量的贡献均为 1; 对于现代 CPU 而言，这一假定基本上是成立的[1]。

☞ [1] 参见 https://stackoverflow.com/a/39720217.

i. Householder 方法

- 逐列循环 $\sum_k^n$:
  - 考察对角元及以下元素，构成子空间矢量 x; 构造 $(n-k+1)\sim(n-k)$ 维 Householder 变换，大致需进行如下操作：
    * 求模方 $\|x\|^2$, 复杂度 $\mathcal{O}\big(2(n-k)\big)$;
    * 据 x 构造变换矢量 v, $\mathcal{O}(1)$;
    * 求 $\|v\|^2$, 利用 $\|x\|^2$, 仅需 $\mathcal{O}(1)$.

    这一步共需计算量 $\mathcal{O}\big(2(n-k)\big)$.
  - 对 $\sim(n-k)$ 维子空间作用 Householder 变换 $H=\mathbb{1}-2vv^{\mathrm{T}}/\|v\|^2$,
    * 首先看 v^{T}, 作用在 $(n-k)$ 维子空间上，$\mathcal{O}\big(2(n-k)^2\big)$;
    * $H=\mathbb{1}-2vv^{\mathrm{T}}/\|v\|^2$, 表面上看还需 $\mathcal{O}\big(4(n-k)^2\big)$; 但实际可对每一行 i 先计算系数 $2v_i/\|v\|^2$, 这样计算量可削减为 $\mathcal{O}\big(2(n-k)^2\big)$.

    这一步共 $\mathcal{O}\big(4(n-k)^2\big)$.

  这样便得到了 QR 分解后的 R 矩阵，

$$\text{计算量}\sim\sum_k^n 4\,(n-k)^2\sim\frac{4}{3}\,n^3 \tag{1.a.1}$$

  某些参考材料给出 $\mathcal{O}\big(\frac{2}{3}\,n^3\big)$ 的计算量，那是仅考虑了乘法计算的结果[2]。

  ☞ [2] 参见 https://en.wikipedia.org/wiki/QR_decomposition#Using_Householder_reflections.

  事实上，到此为止我们已经完成了 QR 分解，只是没有显式地获得 Q 矩阵；但大部分情况下我们只需知道等价的 Householder 矢量 v 即可，无需显式地写出 Q 矩阵。

- 若要进一步获得显式的 Q 矩阵，只需将 Householder 矩阵累乘即得；注意到 Householder 矩阵作用的子空间维数 $(n-1),(n-2),\ldots$ 顺次递减，完全类似，有：

$$\text{计算量}\sim\sum_{k'}^n 4\,(k')^2\sim\frac{4}{3}\,n^3 \tag{1.a.2}$$

  即若要显式地得到 Q, 总计算量为 $\mathcal{O}\big(\frac{8}{3}\,n^3\big)$.

ii. Givens 方法

- 逐行循环 $\sum_i^n$:
  - 对 $j<i$ 逐列循环 $\sum_j^i$:
    * 构造转动矩阵，$\mathcal{O}(1)$;
    * 作用变换，仅会影响 i,j 两行；且前面的迭代已经保证 $k<j<i$ 时 $R_{ik}=R_{ij}=0$, 故只需 $\mathcal{O}\big(6(n-j)\big)$; 这里的 6 即二维旋转的计算量。
    * 若还需显式求出 Q 矩阵，还需 $\mathcal{O}(6i)$; 注意由于 Givens 变换局限在 $\sim i$ 维子空间内，故只需 $\sim 6i$ 而非 $6n$ 步计算。

    共 $\mathcal{O}\big(6(n-j)\big)+\mathcal{O}(6i)$.

求和可得：

$$\text{计算量}\sim\sum_i^n\sum_j^i\big(6(n-j)+6i\big)\sim\sum_i^n\big((6ni-3i^2)+6i^2\big)\sim 2n^3+2n^3=4n^3 \tag{1.a.3}$$

Householder 和 Givens 的计算量（领头阶）综合比较如下：

方法	求 R	同时给出显式 Q
Householder	$\frac{4}{3}\,n^3$	$\frac{8}{3}\,n^3$
Givens	$2n^3$	$4n^3$

可见，两种方法的复杂度同阶，Givens 要更高一些；且对任一种方法而言，若要显式地给出 Q, 计算量差不多要翻倍。由此可得，最好的办法是用 Householder 矢量或 Givens 转动参数储存 Q, 需要 Q 作用时再根据参数逐次作用。