

一、实验目的与要求

1. 熟练掌握 QR 分解 Gram - Schmidt 方法;
2. 掌握 Householder 方法;
3. 能够判断矩阵是否可逆, 并求出其逆矩阵。

二、问题

读取附件MatrixA.mat文件中的矩阵A, 利用Gram - Schmidt (GS) 算法对A进行QR分解, GS的Matlab代码如1所示。

- (1) 验证GS是否能稳定进行QR分解矩阵A, 其Q矩阵是否正交?

```
[m,n] = size(A);    % 读取矩阵A的大小
Q = zeros(m,n);     % 初始Q矩阵
R = zeros(n,n);     % 初始R矩阵

for k=1:n
    R(1:k-1,k) = Q(:,1:k-1)'*A(:,k);    % 实现什么
    v= A(:,k) - Q(:,1:k-1)*R(1:k-1,k);  % ?
    R(k,k) = norm(v);                    % ?
    Q(:,k) = v/R(k,k);                   % ?
end
```

图1. Gram - Schmidt算法的Matlab代码

- (2) 实现Householder方法QR分解代码, 并验证其对矩阵A分解是否稳定?
- (3) 读取附件MatrixB.mat文件的方矩阵B, 判断其是否可逆? 如果可逆, 求其逆矩阵。

三、模型建立及求解

一、解决问题思路

本次实验实现过程的思维逻辑如图 2 所示，老师审批辛苦了🙏！

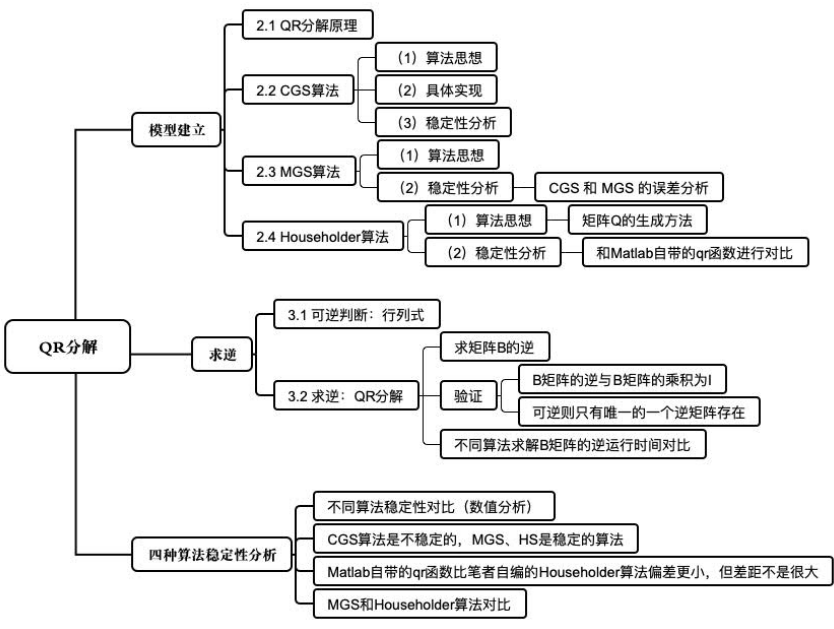


图 2 QR 实验实现过程思维逻辑图

二、模型建立与分析

2.1 QR 分解原理

QR 分解即将矩阵分解成一个正交矩阵与一个上三角矩阵的积，经常被用来求解线性最小二乘法问题。其定义如下：

一个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$ 且列向量之间线性无关，可以被分解成 $A = QR$ ，其中， $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 是正交矩阵 ($Q^T Q = I$) $R \equiv \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\hat{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是上三角矩阵

QR 分解的实际计算有很多方法，每一种方法都有其优点和不足。本实验笔者将尝试使用 Gram-Schmidt 正交化 (CGS+MGS) 和 Householder (自编 HS+Matlab qr) 方法进行 QR 分解，并对比分析不同方法的稳定性。

2.2 CGS 算法 (Classic Gram-Schmidt Orthogonalization)

(1) 算法思想

表 1: Classic Gram-Schmidt 算法流程	
1:	$r_{11} = \ a_1\ _2$
2:	$q_1 = a_1/r_{11}$
3:	for $j = 2$ to n do
4:	$q_j = a_j$
5:	for $i = 1$ to $j - 1$ do
6:	$r_{ij} = q_i^T a_j$
7:	$q_j = q_j - r_{ij}q_i$

```

8:      end for
9:       $r_{jj} = \|q_j\|_2$ 
10:      $q_j = q_j/r_{jj}$ 
11: end for

```

由表 1CGS 算法可知：

$$a_1 = r_{11}q_1, a_j = r_{1j}q_1 + r_{2j}q_2 + \cdots + r_{jj}q_j = [q_1, q_2, \dots, q_j] \begin{bmatrix} r_{1j} \\ r_{2j} \\ \vdots \\ r_{jj} \end{bmatrix}, j = 2, 3, \dots, n$$

记 $Q = [q_1, q_2, \dots, q_n], R = [r_{ij}]_{n \times n}$, 其中 $r_{ij} = \begin{cases} q_i^T a_j, & \text{for } i \leq j \\ 0, & \text{for } i > j \end{cases}$

于是 Gram-Schmidt 过程可表示为

$$[a_1, a_2, \dots, a_n] = [q_1, q_2, \dots, q_n] \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & r_{n-1,n} \\ & & & r_{nn} \end{bmatrix}, \text{即 } A = QR$$

（2）具体实现

实验模板（图 1）已经给出了 CGS 算法的完整代码，先对循环内的四行代码功能进行解释，如表 2 所示。但是该代码省略了当 $j=1$ 时的情况，之所以能够缩减，是因为矩阵(1:0,:) 是一个空矩阵。

表 2:CGS 算法代码解析

- 1: 生成了 $r_{ij} = q_i^T a_j$ ($r_{1j} = q_1^T a_j, r_{2j} = q_2^T a_j, \dots, r_{j-1,j} = q_{j-1}^T a_j$)
- 2: 生成了 $q_j = a_j - r_{ij}q_i$
- 3: q_j 的 2 范数作为了 R 对角线元素 r_{jj}
- 4: 对 q_j 进行单位化

（3）稳定性分析（题目 1:验证 GS 是否能稳定进行 QR 分解矩阵 A，Q 矩阵是否正交）

通过该算法求得矩阵 Q，为了验证 Q 矩阵的正交性，可以计算 q_j 与前面列正交性的偏差（偏差 = $\max_{1 \leq i < j} |q_i^T q_j|, j = 2, \dots, n$ ），结果如图 3 所示。实验结果说明了 CGS 方法并不能稳定地进行 QR 分解，当 $j > 36$ 时， q_j 与前面列不再具有严格的正交关系，因此 Q 矩阵的正交性也就不存在了。

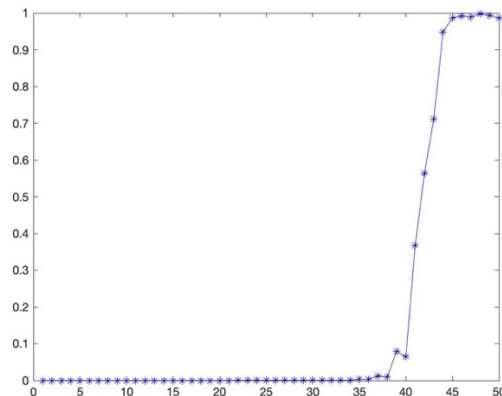


图 3 CGS:Q 矩阵的正交性偏差

值得注意的是,观察 CGS 算法过程,可以发现,唯一可能在理论上出问题的情况就是,出现某个 $r_{jj} = 0$,导致在算法(表 X)第 10 行($q_j = q_j/r_{jj}$)出现分母为 0 的情况。因此只要 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 是满秩的,且每个 $r_{jj} > 0$,那么 QR 分解的结果就是唯一的。

经典 GS 算法给笔者的第一印象是十分完美,并为算法的创造者钦佩之至。但是计算机总是个不完美的发明,体现不了数学理论的和谐,由于计算机浮点数存储的舍入误差,经典的 GS 算法对舍入误差很敏感,容易导致生成的基 q_j 的正交性随着迭代越来越弱,因此笔者在本实验中引入 MGS 算法。

2.3 MGS 算法 (Modified Gram-Schmidt Orthogonalization)

(1) 算法思想

改进的 GS 算法 (MGS) 核心思想是: 在每个 q_j 生成后,直接把 A 剩下的列(表 3 算法第 10 行)都去掉 q_j 的成分(表 3 算法的第 11、12 行)。由于只是改变了计算的顺序,所以理论上计算结果是一样的。

表 3: Modified Gram-Schmidt 算法实现 QR 分解

```

1: Set  $R = [r_{ij}] = 0_{n \times n}$  (the  $n \times n$  zero matrix)
2: if  $a_1 = 0$  then
3:    $q_1 = 0$ 
4: else
5:    $r_{11} = \|a_1\|_2$ 
6:    $q_1 = a_1/\|a_1\|_2$ 
7: end if
8: for j= 2 to n do
9:    $q_j = a_j$ 
10:  for i = 1 to j-1 do
11:     $r_{ij} = q_i^T q_j$  % MGS 和 CGS 的区别
12:     $q_j = q_j - r_{ij}q_i$ 
13:  end for
14:  if  $q_j \neq 0$  then
15:     $r_{jj} = \|q_j\|_2$ 
16:     $q_j = q_j/r_{jj}$ 
17:  end if
18: end for
    
```

(2) 稳定性分析

通过 MGS 算法求得矩阵 Q, 同样绘制 q_j 与前面列之间的正交性的偏差(如图 4 所示), 可以看到 Q 矩阵正交性偏差极小, 偏差的数量级为 10^{-7} , 可以忽略不计, 可以认为 MGS 对矩阵 A 的分解稳定。笔者通过将 CGS 和 MGS 算法得到的 Q 矩阵正交性偏差放到一起, 从图 5 可以直观地看到这两种算法的稳定性差距。

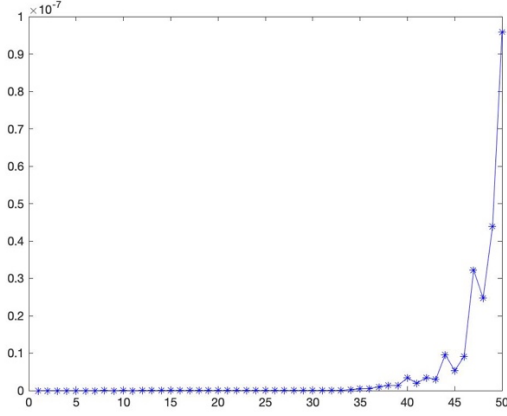


图 4 MGS:Q 矩阵的正交性偏差

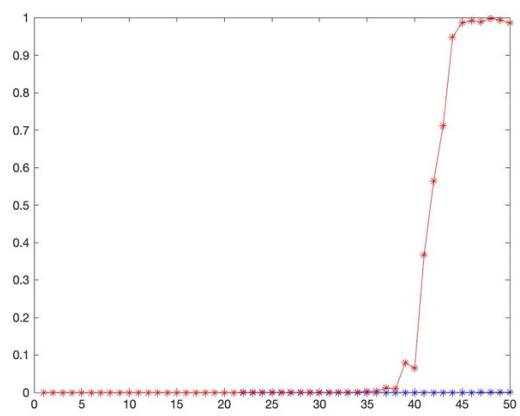


图 5 CGS (红) 和 MGS (蓝) 偏差对比

(1) 可以看到,改进之后稳定性会大幅提升,从实际计算步骤上来看:CGS 算法和 MGS 算法区别在于:CGS 算法中,每次迭代新的一列 q_i ,计算每个 $r_{ij} = q_i^T q_j$ 都是用的同一个 q_j ,而 MGS 算法计算 r_{ij} 的时候用的 q_j 是已经减去前面 $j-1$ 个基的分量之后的 q_j 。

(2) 这样做的好处是:误差的传递是局部的。比如计算 q_1 是精确的,计算 q_2 出现误差,即 q_2 在 q_1 上存在一个微小分量,按照 CGS 算法,接下来要分别计算 q_3 在 q_1 和 q_2 的分量,最终 $q_1^T q_3 \neq 0, q_2^T q_3 \neq 0$;而 MGS 算法则先计算 q_3 在 q_1 上的分量,去除掉这个分量之后成为 q'_3 ,再计算并去除 q'_3 在 q_2 上的分量得到最终的 q''_3 ,此时如果计算是精确的,那么至少可以保证 $q''_3 \perp q_2$ 。

(3) 从另一个角度分析,根据(Rice J R,1966)¹中对 CGS 和 MGS 的误差分析。

由于计算机舍入误差的存在, $(q_i, q_j) = \epsilon_{ij}, i, j \leq k-1$;

$a_k = \sum_{i=1}^{k-1} R_{ik} q_i + \eta$, η 是与标准正交基 q 正交的一个向量, $(\eta, q_i) = 0$;

$q'_k = \eta - \sum_{j=1}^{k-1} (\sum_{i \neq j} R_{ik} \epsilon_{ij}) q_j$;

$q_k = \frac{q'_k}{\|q'_k\|}$, 如果 η 较小, 则 q_k 主要由 $q_i, i = 1, \dots, k-1$ 的线性组合构成, 则 $\epsilon_{k,k-1}$ 更加

接近 1; 而对于 MGS, 在每计算出一列 q 后, 将A中剩余的各列向量,分别减去其在 q 上的投影:

$$a_i^{(k)} = a_i^{(k-1)} - q_k (q_k^T a_i^{(k-1)}), i = k+1, \dots, n$$

$$(a_i^{(k)}, q_k) = (a_i^{(k-1)}, q_k) - (a_i^{(k-1)}, q_k) (q_k, q_k) = 0, \text{ 即 } \epsilon_{k,k-1} = 0, \text{ 而在 GS 中, 这一}$$

项逐渐更可能接近 1。

2.4 Householder 算法

(1) 算法思想

定理:设 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$ 是一个非零向量,则存在 Householder 矩阵 $H(v)$ 使得 $H(v)x = \alpha e_1$,其中 $\alpha = \|x\|_2$ (或 $\alpha = -\|x\|_2$), $e_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^n$ 。

通过上述定理可知, 通过 Householder 变换可以将任何一个非零变量 $x \in \mathbb{R}^n$ 转化成 $\|x\|_2 e_1$,即除第一个元素外,其它都为零。通过 Householder 变换来实现矩阵的QR分解的算法

¹ Rice J R . Experiments on Gram-Schmidt orthogonalization[J]. Mathematics of Computation, 1966, 20(94):325-328.

流程如表 4 所示:

表 4: 基于 Householder 变换的 QR 分解

```

1: Set  $Q = I_{m \times m}$ 
2: for  $k = 1$  to  $n$  do
3:    $x = A(k:m, k)$ 
4:    $[\beta, v_k] = \text{House}(x)$     $\% \tilde{H}_k = I - \beta v_k v_k^T$ 
5:    $A(k:m, k:n) = (I_{m-k+1} - \beta v_k v_k^T) A(k:m, k:n)$ 
6:    $= A(k:m, k:n) - \beta v_k (v_k^T A(k:m, k:n))$ 
7:    $Q(:, k:m) = Q(:, k:m) (I_{m-k+1} - \beta v_k v_k^T)$ 
8:    $= Q(:, k:m) - \beta (Q(:, k:m) v_k) v_k^T$ 
9: end for

```

上述表 4 的算法只是关于利用 Householder 变换来实现 QR 分解的一个简单描述,并没有考虑运算量问题。在实际计算时,笔者保留了所有的 Householder 向量。由于 \tilde{H}_k 所对应的 Householder 向量 v_k 的长度为 $m - k + 1$,因此先把 v_k 单位化,使得 v_k 的第一元素为 1,这样就只要存储 $v_k(2:end)$,共 $m - k$ 个元素。这样就可以把所有的 Householder 向量存放在 A 的严格下三角部分,而 A 的上三角部分仍然存放 R ,若在计算 Q 时采用向后累积的方法,总的运算量大约为 $4m^2n - 2mn^2 + \frac{2}{3}n^3$ 。若 $m = n$,则运算量大约为 $\frac{8}{3}n^3$ 。

这里笔者对此算法矩阵 Q 的生成方法进行了进一步的探讨:

- (1) 如果不需要生成 Q ,则基于 Householder 变换的 QR 分解的总运算量大约为 $2mn^2 - 2n^3/3$ 。
- (2) 如果保留了每一步的 Householder 向量,则 Q 也可以通过下面的向后累积方法实现:

$$\begin{cases} Q = I_n \\ Q = QH_k, k = 1, 2, \dots, n-1 \end{cases}$$

这样做的好处是一开始 Q 会比较稀疏,随着迭代的进行, Q 才会慢慢变满。采用这种方法计算 Q 的运算量大约为 $4m^2n - 4mn^2 + 4n^3/3$

- (3) 如果将 Q 写成下面的形式,

$$Q = I + WY^T$$

则可以采用分块形式来计算 W 和 Y ,虽然运算量会稍有增长,但大多数运算是矩阵乘法,因此可以尽可能多地采用 3 级 BLAS 运算,效率可能会更高(G. H. Golub, 2013)²

(2) 稳定性分析 (题目 2:实现 Householder 代码, 并验证其对矩阵 A 分解是否稳定)

通过 Householder 算法求得矩阵 Q , 同样绘制 q_j 与前面列之间的正交性的偏差 (如图 6 所示), 可以看到正交性偏差极小, 偏差的数量级为 10^{-15} , 可以忽略不计, 验证了 HS 算法对矩阵 A 的分解稳定。

² G. H. Golub and C. F. Van Loan, Matrix Computations, The 4th Editon, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 2013. 20, 37, 83, 87, 89, 105, 121, 152, 153

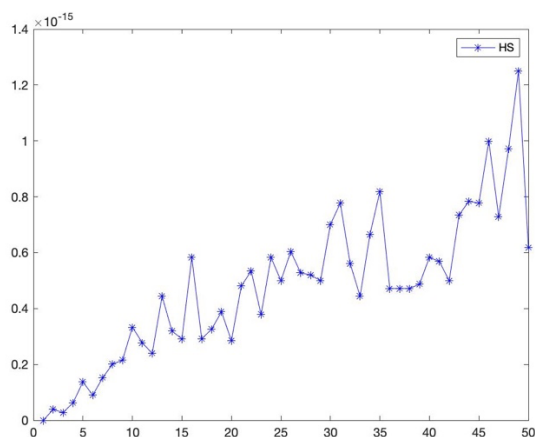


图 6 Householder:Q 矩阵的正交性偏差

笔者进一步将自编的 Householder 算法和 Matlab 自带的 `qr` 函数进行对比，使用两种方法对矩阵 A 和矩阵 B 进行 QR 分解，同样绘制 q_j 与前面列之间的正交性的偏差（如图 7 所示），可以看到 Matlab 自带的 `qr` 函数比笔者自编的 Householder 算法偏差更小，但差距不是很大。通过对查找资料，笔者发现这很大可能是因为 Matlab 的 `qr` 函数通过对矩阵 Q 的生成方法进行了优化（上一小节已对此进行了解释），提升了性能，这也是笔者将来可以改进的方向。

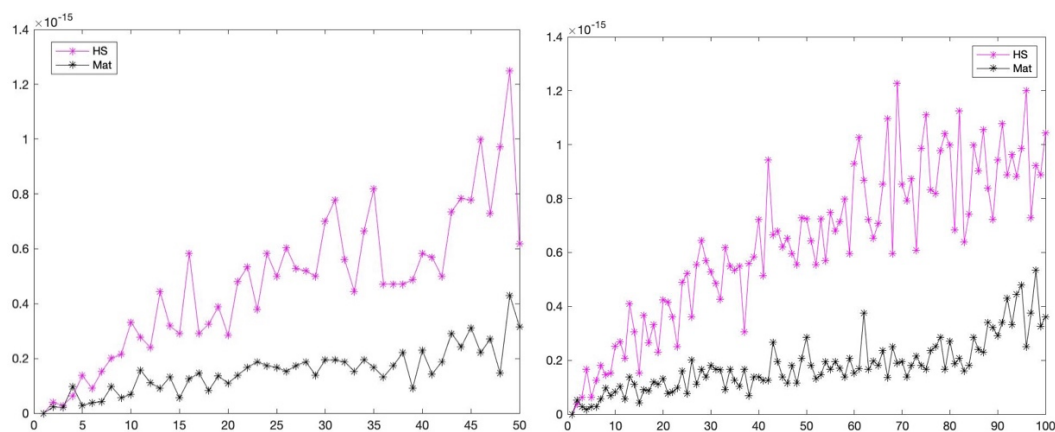


图 7 自编 HS 和 `qr` 函数正交性偏差对比（紫:自编,黑:Matlab）（左:A 矩阵,右:B 矩阵）

三、求逆（题目：读取方矩阵 B，判断其是否可逆？如果可逆，求其逆矩阵）

3.1 可逆判断：行列式

对于可逆判断，在学习 QR 分解之前，可以通过求矩阵 B 的行列式进行判断，若为 0，则不可逆；若不为 0，则为可逆。通过 Matlab 的 `det` 函数求得矩阵的 B 的行列式为 0.9048，非 0，说明 B 的列向量线性无关，可逆，非奇异。

3.2 求逆：QR 分解

矩阵 B 非奇异，则 B 矩阵就可进行 QR 分解，其逆可以表示为 $B^{-1} = (QR)^{-1} = R^{-1}Q^T$ ，利用右式，笔者这里使用 Householder 算法来求 B 矩阵的逆。

设 $B = [b_1, b_2, \dots, b_n]$ ，则 $Rb_1 = Q^T e_1, Rb_2 = Q^T e_2, \dots, Rb_n = Q^T e_n$ 。其中，R、Q 已通过 Householder 算法求得，又因为 R 为上三角矩阵，所以可以用回代法循环求解出所有的 b_n ，合并起来就是矩阵 B 的逆。

通过 Householder 算法对矩阵 B 进行 QR 分解的偏差 (10^{-15}) 如图 8 所示, 得到矩阵 B 的逆如图 9 所示 (截取部分, 完整矩阵请见附件 invB.xlsx)

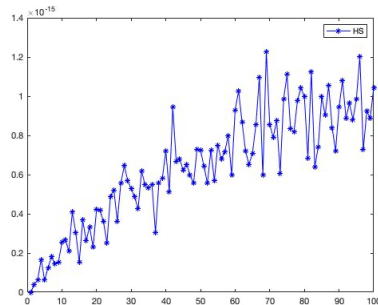


图 8 HS: Q 矩阵的正交性偏差 (B 矩阵)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	-0.066295	-0.032994	-0.115089	0.089447	0.035867	-0.139851	0.04251	-0.047246	-0.061343
2	0.253887	0.004684	0.08804	-0.116144	-0.181523	0.155489	0.039803	-0.17245	-0.011099
3	-0.069709	-0.194462	0.158012	0.093012	-0.028881	-0.058527	-0.032586	-0.07804	-0.138857
4	-0.079475	-0.025087	0.057375	-0.212303	0.028036	0.057162	-0.009416	-0.205155	-0.101597
5	-0.082293	0.012141	0.07073	0.013653	-0.005881	-0.025152	0.03031	-0.087016	0.095958
6	0.051605	-0.120385	-0.102558	-0.097162	-0.002609	-0.209842	-0.114641	-0.003342	-0.00369
7	0.220207	0.024849	0.034204	-0.011495	-0.185967	-0.110168	0.032647	-0.00196	-0.00525
8	-0.018169	0.085438	0.02881	-0.074634	-0.050264	0.151905	-0.041744	-0.049735	0.03598
9	-0.035687	-0.084985	0.115667	-0.120177	-0.082666	0.051274	0.152661	0.10622	-0.035313
10	0.045532	0.080155	-0.008192	0.067672	-0.134367	-0.049273	0.073203	-0.044099	0.180152
11	0.122042	-0.280151	-0.067699	0.069451	0.200515	0.099851	0.064929	-0.127339	0.096995
12	0.148105	0.083882	-0.123501	-0.125729	-0.043591	0.043132	-0.029425	0.010608	0.013326
13	0.149072	0.036349	-0.069232	0.135508	0.051215	-0.117153	0.043335	0.031921	0.018276
14	0.1146	-0.183127	-0.004915	0.096462	-0.113681	0.226328	0.030771	0.014322	-0.057649
15	0.001015	-0.084391	-0.195474	-0.062822	-0.004408	0.000286	-0.216564	0.116715	0.140245

图 9 矩阵 B 的逆 (部分)

接着, 笔者进一步进行了验证, 通过基于 Householder 算法的计算, 所求得的 B 矩阵的逆与 B 矩阵的乘积为 I, 说明算法稳定性较好。

从理论上来说, B 矩阵若可逆则只有唯一的一个逆矩阵存在, 因此笔者尝试将该算法求的 B 的逆矩阵与 Matlab 算法算得的 B 的逆矩阵 (命令为: $\text{InvB} = \text{inv}(\text{B}' * \text{B}) * \text{B}'$) 做差, 通过命令 $\text{det}(\text{InvA} - \text{X})$ 求的 $\text{ans} = 0$, 再一次进行了验证。

为了再次对比 4 种不同算法 QR 分解稳定性的差异, 笔者使用不同的算法来求解 B 矩阵的逆并计算运行时间 (由于单次运行时间过短, 笔者对每一种方法运行了 10 次并取均值), 得到的结果如表 5 所示。可以看到 Matlab 直接求解运行速度最快, 可能是因为笔者在求逆的时候为了照顾完备性, 使用了 backsub 回代法函数导致了性能稍微降低有关, 但整体上, 不同算法的运行时间差距不是很大。

表 5: 不同算法求解 B 矩阵的逆运行时间对比

算法	CGS	MGS	HS	Matlab
运行时间	0.0402	0.0394	0.0361	0.0211

四、四种算法稳定性分析

笔者最后再一次对四种 QR 分解方法求解的正交性偏差进行总结对比, 使用 A 矩阵作为实验对象, 不同算法的稳定性如下表 6 所示。表 6 可帮助我们数值角度进行分析, 接下来笔者结合可视化图表进行一些总结。

表 6: 不同算法稳定性对比 ($\max_{1 \leq i < j} |q_i^T q_j|, j = 2, \dots, n$)

n	CGS	MGS	HS	Matlab_qr
2	4.77E-18	8.24E-17	3.90E-17	3.90E-17
10	2.18E-13	5.98E-15	3.33E-16	3.33E-16
15	1.50E-11	2.27E-14	2.91E-16	2.91E-16
20	3.57E-09	2.93E-13	2.84E-16	2.84E-16
25	1.27E-07	7.19E-12	5.00E-16	5.00E-16
30	6.99E-05	2.85E-11	7.01E-16	7.01E-16
35	0.00375005	4.55E-10	8.19E-16	8.19E-16
40	0.06427329	3.41E-09	5.83E-16	5.83E-16

45	0.9866304	5.34E-09	7.77E-16	7.77E-16
50	0.98644042	9.58E-08	6.18E-16	6.18E-16

(1) 将 4 种算法的偏差进行对比 (图 10), 说明 CGS 算法是不稳定的, MGS、HS 是稳定的算法

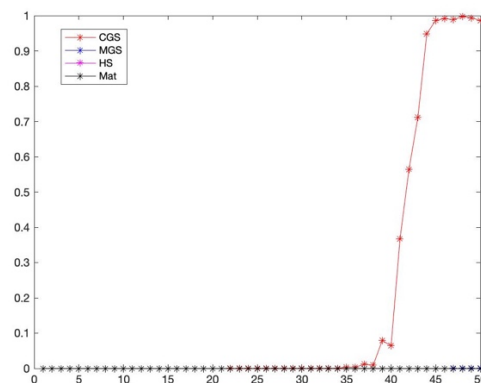


图 10 4 种算法的偏差对比

(2) Matlab 自带的 qr 函数比笔者自编的 Householder 算法偏差更小, 但差距不是很大。(上述图 7 已进行分析)

(3) 基于 Householder 的 QR 分解都具有很好的数值稳定性, 基于 MGS 的 QR 分解也是向后稳定的 (C. C. Paige, 2006)³ 那么两种算法哪一种更优呢? 笔者将进行探讨:

首先分别使用 MGS 和 HS 算法对 A 矩阵和 B 矩阵进行 QR 分解, 得到的结果如图 11 所示。实验结果表明, 对 $n=50$ 的矩阵 A 进行 QR 分解, HS 算法表现更优; 对 $n=100$ 的矩阵 B 进行 QR 分解, MGS 的表现更优。

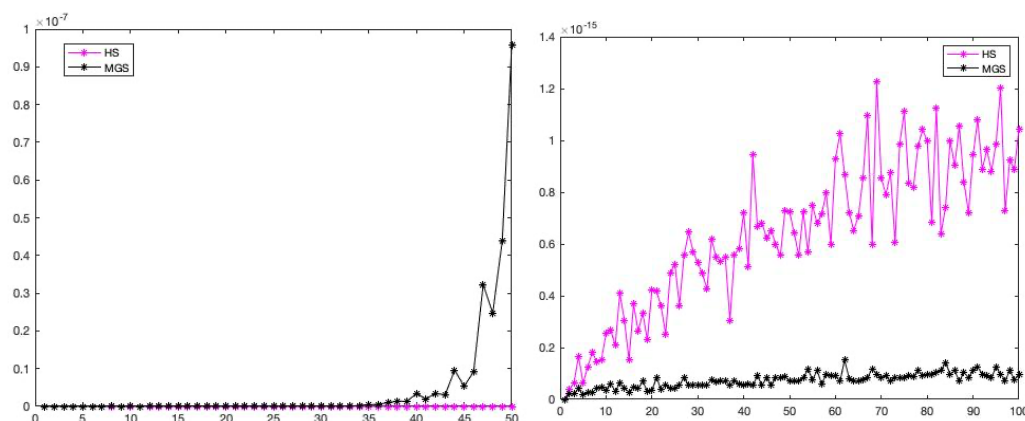


图 11 MGS 和 Householder 算法对比 (左: 矩阵 A; 右: 矩阵 B)

通过查阅资料, 发现当需要计算矩阵 Q 时, 基于 MGS 的 QR 分解的运算量相对较少, 因此当 A 的列向量具有很好的线性无关性时, 可以使用 MGS 来计算 QR 分解。但需要注意的是, MGS 得到的 Q 不是方阵, 除非 A 是方阵。

由于舍入误差的原因, 最后得到的矩阵 Q 会带有一定的误差, 可能会导致 Q 失去正交性。

³ C. C. Paige, M. Rozložník and Z. Strakoš, Modified Gram-Schmidt (MGS), least squares, and backward stability of MGS-GMRES, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, (28) 2006, 264-284. 85

(Björck,1967)⁴证明了,通过 MGS 计算的矩阵 Q 满足

$$Q^T Q = I + E_{MGS} \text{ 其中 } \|E_{MGS}\|_2 \approx \varepsilon_u \kappa_2(A).$$

而 Householder 变换计算的矩阵 Q 满足

$$Q^T Q = I + E_H \text{ 其中 } \|E_H\|_2 \approx \varepsilon_u.$$

因此,如果正交性至关重要,则当 A 的列向量接近线性相关时,最好使用 Householder 变换。

四、小结（可含个人心得体会）

4.1 实验总结

笔者在上述已经对本次实验进行了很详细的总结，这里主要再从理论角度对 Gram-Schmidt 算法和 Householder 算法进行总结对比，如下表 7 所示：

表 7 Gram-Schmidt 算法和 Householder 算法对比				
算法复杂度		优点	缺点	
GS	$2mn^2$	(1) 适合小矩阵计算；	(1)	不适合稀疏矩阵；
		(2) 每次迭代都生成一个正交基，可以随时停止计算(HS 只能在迭代结束之后才可以计算全部正交基，中间产生了大量的半成品。)	(2)	在有限精度的病态矩阵中会导致大量误差；
HS	$4m^2n - 2mn^2 + \frac{2}{3}n^3$	(1) 不显式计算 Q 矩阵，只保存若干个反射矩阵 H ，适合某些仅需要 R 的任务；	(1)	迭代的过程不产生可用的正交基，必须等到全部迭代完成，无法中断；
		(2) 最适合稠密矩阵。	(2)	对于稀疏矩阵会产生大量无效计算。

如表 7 所示，在算法复杂度方面，Householder 算法更占优势，但是实际工程上，需要根据任务要求和矩阵稠密度灵活分析。例如需要使用 Q 矩阵的标准正交基，则 GS 算法更适合。在算法稳定性方面，两种算法都不适合应用于稀疏矩阵。由于计算机用浮点数格式存储数，当其绝对值很小时，其值会被认为 0。所以如果一个矩阵中的数值过小，或者说该矩阵的行列式的值过小，则会使得该两种方法的应用都失去稳定性。

4.2 个人体会

这次实验考察的内容很多，笔者对 QR 分解有了更深的认识，对于算法的性能和稳定性也有了重新的认识。此外，Matlab 编程水平也进一步提高。

整个实验过程花费了很多时间，也查阅了很多资料和文献，这种钻研理解、实验验证的过程真的需要很多耐心和时间，但是当我敲下结尾这段快结束了的字，这种成就感和探索过后有收获真的很好，也许这就是所谓学习的快乐，只希望恨不得有更多的时间...

⁴ Åke Björck, Solving linear least square problems by Gram-Schmidt orthogonalization, BIT, 7 (1967), 1–21. 85