همان‌طور که ملاحظه شد در دینامیک سیالات محاسباتی ماتریس‌ها نقش بنیادی و حیاتی دارند، زیرا پس از گسسته‌سازی معادلات دیفرانسیل جزئی حاکم بر جریان سیال، مانند معادلات ناویر–استوکس، این معادلات به دستگاه‌های معادلات جبری بزرگ تبدیل می‌شوند که معمولاً به‌صورت ماتریسی نمایش داده می‌شوند. روش‌های حل دستگاه معادلات دو دسته‌ی کلی مستقیم و تکراری تقسیم می‌شوند. روش‌های مستقیم در حل دستگاه‌های معادلات خطی به آن دسته از روش‌ها گفته می‌شود که در یک تعداد محدود عملیات، پاسخ دستگاه را (با دقت بالا و بدون نیاز به تکرار) محاسبه می‌کنند. برخلاف روش‌های تکراری که پاسخ را به‌تدریج و با تقریب به‌دست می‌آورند، روش‌های مستقیم سعی می‌کنند جواب دقیق عددی را با استفاده از دگرگونی‌های جبری به‌دست آورند. از جمله روش‌های مستقیم می‌توان به روش حذفی گاوس[1]، روش گاوس–جردن[2] ، روش تجزیه ال یو[3]، روش کرامر[4] و روش مثلثی‌سازی[5] اشاره کرد که بحث در مورد آن‌ها خارج از سرفصل‌های این کتاب است. در روش‌های تکراری حل با یک حدس اولیه شروع شده و در گام‌های متوالی به جواب نزدیک می‌شوند. این روش‌ها برای دستگاه‌های بزرگ و پراکنده مناسب‌تر هستند. روش ژاکوبی[6] ، روش گوس–سایدل[7] و سور[8] از مهم‌ترین روش‌های تکراری برای حل دستگاه معادلات هستند.

در روش ژاکوبی هر مجهول در معادله به‌صورت صریح از بقیه متغیرها جدا شده و مقدار جدید آن بر پایه مقادیر قبلی سایر متغیرها محاسبه می‌شود. در واقع، برای هر تکرار، تمام مقادیر جدید متغیرها به‌طور هم‌زمان و مستقل از یکدیگر بر اساس مقدارهای قبلی به‌روزرسانی می‌شوند. برای شروع، یک حدس اولیه برای متغیرها زده می‌شود و سپس با استفاده از روابط استخراج‌شده، مقدارهای جدید به‌دست آمده و این فرآیند تا رسیدن به همگرایی

[1] Gaussian Elimination
[2] Gauss–Jordan
[3] LU Decomposition
[4] Cramer’s Rule
[5] Triangularization
[6] Jacobi Method
[7] Gauss–Seidel
[8] SOR - Successive Over Relaxation

(یعنی تغییرات بسیار کوچک بین تکرارها) ادامه پیدا می‌کند. شرط مهم برای همگرایی روش ژاکوبی این است که ماتریس ضرایب دارای خاصیت قطری غالب باشد. لازم به ذکر است که ماتریس قطری غالب ماتریسی است که در هر سطر، مقدار مطلق عنصر قطری از مجموع مقادیر مطلق سایر عناصر آن سطر بزرگ‌تر باشد. در حالتی که ماتریس قطری غالب نیست گاهی اقات می‌توان با جابجایی سطرها آن ماتریس را قطری غالب کرد. برای درک بهتر این روش از یک مثال استفاده می‌شود.

مثال: دستگاه معادلات زیر را به کمک روش تکراری ژاکوبی حل کنید.

$$\begin{cases} 4x + y - z = 3 \\ 2x + 5y + z = 10 \\ x + y + 3z = 7 \end{cases}$$

از آنجا که ماتریس قطری است، روش ژاکوبی همگرا خواهد بود. برای حل معادلات ابتدا یک حدس انتخاب کنید. به عنوان مثال حدس زیر انتخاب می‌شود:

$$\begin{cases} x^0 = 0 \\ y^0 = 0 \\ z^0 = 0 \end{cases}$$

در مرحله اول برای هر معادله، متغیر مربوطه را به‌صورت زیر جدا کنید (معادلات ژاکوبی) :

$$\begin{cases} x = \dfrac{1}{4}(3 - y + z) \\ y = \dfrac{1}{5}(10 - 2x - z) \\ z = \dfrac{1}{3}(7 - x - y) \end{cases}$$

برای حل در مرحله دوم مقدار حدس اولیه را در معادلات ژاکوبی قرار داده و جواب جدید تعیین کنید:

$$\begin{cases} x^1 = \frac{1}{4}(3 - 0 + 0) = 0.75 \\ y^1 = \frac{1}{5}(10 - 2 \times 0 - 0) = 2 \\ z^1 = \frac{1}{3}(7 - 0 - 0) = 2.33 \end{cases}$$

در مرحله بعد مقادیرفوق را به عنوان حدس جدید در نظر گرفته و با جایگذاری در معادلات ژاکوبی جواب جدید تعیین کنید:

$$x^2 = \frac{1}{4}(3 - 2 + 2.33) = 0.83$$
$$y^2 = \frac{1}{5}(10 - 2 \times 0.75 - 2.33) = 1.23$$
$$z^2 = \frac{1}{3}(7 - 0.75 - 2) = 1.42$$

در تکرار بعد با جایگذاری مقادیر فوق در معادلات ژاکوبی حل جدید محاسبه می‌گردد:

$$x^3 = \frac{1}{4}(3 - 1.23 + 1.42) = 0.80$$
$$y^3 = \frac{1}{5}(10 - 2 \times 0.83 - 1.42) = 1.38$$
$$z^3 = \frac{1}{3}(7 - 0.83 - 1.233) = 1.65$$

با تکرار مراحل فوق حل تا زمانی که زمانی که اختلاف جواب بین دو تکرار متوالی از یک مقدار (معیار همگرایی) کوچک‌تر شود ادامه می‌یابد. مشاهده می‌شود که با تکرارهای بیشتر، روش ژاکوبی به جواب زیر نزدیک می‌شود:

$$\begin{cases} x = 0.83 \\ y = 1.33 \\ z = 1.67. \end{cases}$$

روش گاوس-سایدل یک روش تکراری برای حل دستگاه معادلات خطی است که در هر مرحله از جدیدترین مقادیر محاسبه‌شده برای متغیرها استفاده می‌کند تا همگرایی سریع‌تری نسبت به روش ژاکوبی داشته باشد. در این روش، ماتریس ضرایب باید قطری غالب باشد تا همگرایی تضمین شود. ابتدا حدس اولیه‌ای برای متغیرها زده می‌شود، سپس در هر تکرار، هر متغیر با استفاده از جدیدترین مقادیر به‌روزشده سایر متغیرها محاسبه می‌شود. این روند تا رسیدن به دقت مطلوب ادامه می‌یابد. سرعت همگرایی روش گاوس-سایدل معمولاً بیشتر از روش ژاکوبی است، زیرا در هر تکرار از جدیدترین مقادیر محاسبه‌شده برای متغیرها استفاده می‌کند و در نتیجه اطلاعات به‌روزتری را در محاسبات به کار می‌برد. این ویژگی باعث می‌شود همگرایی سریع‌تر اتفاق بیفتد. با ذکر یک مثال این روش توضیح داده خواهد شد.

مثال: دستگاه معادلات مثال قبل را به کمک روش تکراری گوس سایدل حل کنید.

از آنجا که ماتریس قطری است، روش گوس-سایدل همگرا خواهد بود. برای حل معادلات ابتدا یک حدس انتخاب کنید. به عنوان مثال حدس زیر انتخاب می‌شود:

$$\begin{cases} x^0 = 0 \\ y^0 = 0 \\ z^0 = 0 \end{cases}$$

در مرحله اول برای هر معادله، متغیر مربوطه را به‌صورت زیر جدا کنید (معادلات گوس-سایدل) :

$$\begin{cases} x = \dfrac{1}{4}(3 - y + z) \\ y = \dfrac{1}{5}(10 - 2x - z) \\ z = \dfrac{1}{3}(7 - x - y) \end{cases}$$

برای حل در مرحله دوم مقدار حدس اولیه را در معادلات گوس-سایدل قرار دهید و جواب جدید تعیین کنید. تفاوت اصلی این روش با روش ژاکوبی استفاده فوری از مقادیر به‌روزشده در همان تکرار است:

$$\begin{cases} x^1 = \frac{1}{4}(3 - 0 + 0) = 0.75 \\ y^1 = \frac{1}{5}(10 - 2 \times 0.75 - 0) = 1.70 \\ z^1 = \frac{1}{3}(7 - 0.75 - 1.70) = 1.52 \end{cases}$$

در مرحله بعد مقادیرفوق را به عنوان حدس جدید در نظر گرفته و با جایگذاری در معادلات گوس-سایدل جواب جدید تعیین کنید:

$$x^2 = \frac{1}{4}(3 - 1.70 + 1.52) = 0.70$$
$$y^2 = \frac{1}{5}(10 - 2 \times 0.70 - 1.52) = 1.44$$
$$z^2 = \frac{1}{3}(7 - 0.70 - 1.44) = 1.62$$

در تکرار بعد با جایگذاری مقادیر فوق در معادلات گوس-سایدل حل جدید محاسبه می‌گردد:

$$x^3 = \frac{1}{4}(3 - 1.44 + 1.62) = 0.80$$
$$y^3 = \frac{1}{5}(10 - 2 \times 0.80 - 1.62) = 1.36$$
$$z^3 = \frac{1}{3}(7 - 0.80 - 1.36) = 1.62$$

با تکرار مراحل فوق حل تا زمانی که اختلاف جواب بین دو تکرار متوالی از یک مقدار (معیار همگرایی) کوچک‌تر شود ادامه می‌یابد. مشاهده می‌شود که با تکرارهای بیشتر، روش گوس-سایدل به جواب زیر نزدیک می‌شود:

$$\begin{cases} x = 0.83 \\ y = 1.33 \\ z = 1.67. \end{cases}$$

روش سور یک توسعه‌ای از روش گوس-سایدل است که با هدف افزایش سرعت همگرایی طراحی شده است. در این روش، به‌جای استفاده مستقیم از مقدار جدید هر متغیر، ترکیبی از مقدار جدید و مقدار قبلی آن با یک ضریب شتاب (ω) به کار می‌رود. مقدار این ضریب معمولا بین ۰ تا ۲ انتخاب می‌شود. اگر $\omega = 1$ باشد، روش سور همان گوس-سایدل خواهد بود. مقدار بهینه ω بسته به ساختار دستگاه و ماتریس ضرایب متفاوت است، ولی اگر به‌درستی انتخاب شود، روش سور می‌تواند همگرایی را به‌طور قابل‌توجهی سریع‌تر کند. اگر مقدار ضریب شتاب کمتر از یک باشد به آن ضریب زیر تخفیف[۹] گفته می‌شود و معمولاً سبب کاهش همگرایی می‌شود. پارامتر زیر تخفیف زمانی انتخاب می‌شود که سیستم ناپایدار بوده و دارای حل نوسان یا واگرا است. اگر مقدار ضریب شتاب بیشتر از یک انتخاب شود به آن فوق تخفیف[۱۰] گفته می‌شود که سبب افزایش سرعت همگریی می‌شود. در مثال بعد با ذکر مثال روش سور توضیح داده می شود.

مثال: دستگاه معادلات مثال قبل را به کمک روش تکراری سور حل کنید.

برای حل معادلات ابتدا یک حدس انتخاب کنید. به عنوان مثال حدس زیر انتخاب می‌شود:

$$\begin{cases} x^0 = 0 \\ y^0 = 0 \\ z^0 = 0 \end{cases}$$

مقدار ضریب شتاب انتخاب شود. در این مثال فرض بر این است که این ضریب ۱/۲ انتخاب شده باشد. بر اساس گاوس-سایدل اما با اعمال وزن حل جدید به صورت زیر تعیین می‌شود:

[9] Under-relaxation
[10] Over-relaxation

$$\begin{cases} x^1 = (1-1.2)\times 0 + 1.2\times \dfrac{1}{4}(3-0+0) = 0.90 \\ y^1 = (1-1.2)\times 0 + 1.2\times \dfrac{1}{5}(10-2\times 0.90-0) = 1.97 \\ z^1 = (1-1.2)\times 0 + 1.2\times \dfrac{1}{3}(7-0.90-1.97) = 1.65 \end{cases}$$

در تکرار بعدی مقادیر فوق به عنوان حدس انتخاب و جواب جدید محاسبه می‌شود:

$$\begin{cases} x^2 = (1-1.2)\times 0.90 + 1.2\times \dfrac{1}{4}(3-1.97+1.65) = 0.80 \\ y^2 = (1-1.2)\times 1.97 + 1.2\times \dfrac{1}{5}(10-2\times 0.80-1.65) = 1.35 \\ z^2 = (1-1.2)\times 1.65 + 1.2\times \dfrac{1}{3}(7-0.80-1.35) = 1.62 \end{cases}$$

با استفاده از این مقادیر جواب جدید محاسبه می‌شود:

$$\begin{cases} x^3 = (1-1.2)\times 0.80 + 1.2\times \dfrac{1}{4}(3-1.35+1.62) = 0.83 \\ y^3 = (1-1.2)\times 1.35 + 1.2\times \dfrac{1}{5}(10-2\times 0.83-1.62) = 1.33 \\ z^3 = (1-1.2)\times 1.62 + 1.2\times \dfrac{1}{3}(7-0.83-1.33) = 1.67 \end{cases}$$

با تکرار مراحل فوق حل تا زمانی که اختلاف جواب بین دو تکرار متوالی از یک مقدار (معیار همگرایی) کوچک‌تر شود ادامه می‌یابد. مشاهده می‌شود که روش سور به جواب زیر نزدیک می‌شود:

$$\begin{cases} x = 0.83 \\ y = 1.33 \\ z = 1.67. \end{cases}$$