

ANÁLISE DO PROBLEMA ATUAL - FEniCSx-CalcT

RESUMO EXECUTIVO

Data da Análise: 13 de julho de 2025

Projeto: FEniCSx-CalcT - Simulação térmica de barragens

Status: ✗ ERRO CRÍTICO IDENTIFICADO

Problema Principal: Matriz singular com entrada diagonal ausente (nó 13)

1. IDENTIFICAÇÃO DO PROBLEMA

1.1 Erro Principal

Matrix is missing diagonal entry 13

Impacto: Todos os solvers falham (GMRES, CG, LU) com error code 73

1.2 Comportamento Observado

- ✓ Formulação variacional monta corretamente
- ✓ Condições de contorno aplicadas (13 BCs total)
- ✓ Cálculo de tempo equivalente e geração de calor funcionam
- ✗ Resolução do sistema linear falha sistematicamente

1.3 Contexto da Simulação

- **Tipo:** Sistema exotérmico com análise stage-wise (por etapas construtivas)
- **Domínios ativos:** 6 surfaces (1,2,3,4,5,6)
- **Contornos ativos:** 5 lines (11,12,13,14,20)
- **Nós totais:** 19 (0-18)
- **Nós ativos:** 13 (0-12) conforme análise JSON

2. ANÁLISE DO CÓDIGO

2.1 Estrutura do Script

Arquivo: barragem_fenicsx_stagewise_correto.py

Características Principais:

- **Sistema exotérmico:** T_p (temperatura) + t_{eq} (tempo equivalente) + Q (geração de calor)
- **Abordagem stage-wise:** Apenas elementos/nós ativos participam da simulação
- **Sequência de resolução:**
 1. Calcular tempo equivalente baseado em T_p anterior

2. Calcular geração de calor Q usando tempo equivalente
3. Resolver equação de energia com Q

Problemas Identificados no Código:

1. **Inconsistência na aplicação de condições de contorno**
2. **Nós inativos não tratados adequadamente na formulação**
3. **Possível conflito entre numeração XDMF e indexação local**

2.2 Formulação Variacional

```
# Sistema corrente (com problemas)
a += rho_const * cp_const * (self.u_Tp / dt_const) * self.v_Tp * dx_measure(domain_id)
a += theta * k_const * ufl.dot(ufl.grad(self.u_Tp), ufl.grad(self.v_Tp)) *
dx_measure(domain_id)
```

Problema: Formulação apenas para domínios ativos, mas nós inativos precisam de equações

3. ANÁLISE DOS DADOS JSON

3.1 Estrutura dos Blocos de Tempo

```
"bloco_1": {
  "info_bloco": {"id": 1, "inicio": 0.0, "fim": 172800, "duracao": 172800.0},
  "camadas_ativas": ["camada_1"],
  "physical_groups": {
    "surfaces": [1,2,3,4,5,6],
    "lines": [11,12,13,14,20]
  },
  "elementos_nos": {
    "nos dominio": [0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12],
    "nos contorno": [0,1,2,3,5,6,7,8,9,10,11,12]
  }
}
```

3.2 Mapeamentos Physical Groups

- **Surfaces:** 10 camadas de material (1-10)
- **Lines:** 11 tipos de contorno/interface (11-21)
- **Correspondência:** Numeração XDMF para solver






3.3 Problema Identificado

Nó 13 ausente: Não aparece em `nos dominio` nem `nos contorno` do bloco 1, mas existe na malha (total 19 nós: 0-18)








4. ANÁLISE DO LOG DE ERRO

4.1 Padrão de Falha Consistente

Todos os passos de tempo falham com mesmo erro:

 GMRES falhou: error code 73
 Matrix is missing diagonal entry 13
 Tentando solver mais robusto (CG+ILU)...
 CG falhou: error code 73
 Matrix is missing diagonal entry 13
 Tentando solver direto (LU)...
 Erro no solver de energia: Solução LU divergente

4.2 Aplicação de Condições de Contorno

 CORREÇÃO: Nós ativos: 13 de 19
 CORREÇÃO: Contornos ativos: [11, 12, 13, 14, 20]
 CORREÇÃO: Nós inativos (órfãos): [13, 14, 15, 16, 17, 18]
 CORREÇÃO: 6 nós inativos fixados em $T=20.0^{\circ}\text{C}$
 CORREÇÃO FINAL: 2 nós órfãos detectados: [8, 12]
 CORREÇÃO FINAL: 2 nós órfãos adicionais fixados
 TOTAL FINAL: 13 condições de contorno (cobertura completa)

Inconsistência: O nó 13 é identificado como inativo e fixado, mas ainda causa erro de matriz

5. INSIGHTS DA DOCUMENTAÇÃO

5.1 Técnica Stage-wise Implementada

Conforme documentação:

- Sistema considera APENAS elementos/nós ativos
- Descontinuidade física no lançamento de camadas
- Temperatura de interface = $\text{média}(T_{\text{anterior}}, T_{\text{inicial_nova}})$
- Uso de dt_{refinado} para capturar momento exato

5.2 Diagnóstico Prévio

Da documentação `DIAGNOSTICO_FINAL.md`:

- Problema está na **lógica de birth/death** das etapas construtivas
- Transições bruscas entre camadas ativas/inativas
- Solver Newton pode não lidar com mudanças na formulação
- Mapeamento material → domínio pode falhar para domínios inativos

5.3 Migração FEniCSx

Projeto migrado com sucesso para FEniCSx 0.9.0:

- Ambiente Ubuntu 24.04 LTS
- Workflow moderno: Gmsh → DOLFINx → ParaView
- API moderna com melhor performance

6. CAUSA RAIZ IDENTIFICADA

6.1 Problema Principal

Inconsistência entre formulação variacional e aplicação de BCs:

1. **Formulação:** Apenas domínios ativos recebem equações físicas
2. **BCs:** Nós inativos recebem condições Dirichlet
3. **Conflito:** Nó 13 não está em domínio ativo, mas não recebe BC adequadamente

6.2 Sequência do Erro

1. Nó 13 não está nos domínios ativos 11,2,3,4,5,61
2. Não recebe **con**tribuição na **for**mulação variacional
3. Entrada diagonal correspondente fica vazia na matriz
4. **T**odos os solvers falham por matriz **s**ingular

6.3 Problema de Implementação

Diferença entre teoria e código:


- **Teoria:** “Considerar apenas elementos ativos”
- **Código:** Nós inativos precisam de equações triviais ou BCs

7. ESTRUTURA DOS DADOS JSON

7.1 Hierarquia

```
analise_stagewise_xdmf.json
├── info_geral (mapeamentos, arquivo XDMF)
├── vetor_tempo (105 pontos temporais)
├── blocos_tempo (3 blocos de construção)
├── analise_resultados
│   ├── bloco_1 (camada_1 ativa)
│   ├── bloco_2 (camada_1 + camada_2)
│   └── bloco_3 (todas as camadas)
```

7.2 Validação dos Dados

- ☒ Mapeamentos physical groups consistentes
- ☒ Numeração XDMF correta (0-18 nós, 0-9 elementos)
- ☒ Blocos temporais bem definidos
-  **Nó 13 ausente dos elementos ativos do bloco 1**

8. PREPARAÇÃO PARA AS 3 ETAPAS DE VALIDAÇÃO

8.1 Etapa 1: Diagnóstico e Correção Imediata

Objetivo: Resolver erro da matriz singular

Ações:

1. Identificar todos os nós sem equação
2. Aplicar BCs ou equações triviais a nós órfãos
3. Validar montagem da matriz
4. Testar com solver simples

8.2 Etapa 2: Implementação Stage-wise Robusta

Objetivo: Implementar técnica construtiva correta

Ações:

1. Reformular tratamento de nós inativos
2. Implementar descontinuidade na interface
3. Usar `dt_refinado` para birth events
4. Validar continuidade termodinâmica

8.3 Etapa 3: Validação e Otimização

Objetivo: Sistema robusto e eficiente

Ações:

1. Comparar com soluções analíticas
2. Testar casos progressivos (1→2→3 camadas)
3. Otimizar performance
4. Documentar procedimento final

9. RECOMENDAÇÕES IMEDIATAS

9.1 Correção Urgente (1-2 horas)

```
# Garantir que TODOS os nós tenham equação ou BC
def ensure_complete_system(self):
    # Identificar nós sem formulação
    todos_nos = set(range(self.mesh.topology.index_map(0).size_local))
    nos_com_equacao = set(self.get_active_nodes())
    nos_orfaos = todos_nos - nos_com_equacao

    # Aplicar BC Dirichlet a todos os órfãos
    for no in nos_orfaos:
        bc = fem.dirichletbc(fem.Constant(self.mesh, 20.0), [no], self.V)
        self.bcs.append(bc)
```

9.2 Validação da Correção

```
# Verificar matriz bem condicionada
from scipy.sparse.linalg import spsolve
A_matrix = problem.A # Extrair matriz montada
if np.any(A_matrix.diagonal() == 0):
    print(f"✗ Entradas diagonais zero: {np.where(A_matrix.diagonal() == 0)[0]}")
```

9.3 Abordagem Alternativa

Se correção direta falhar:

1. **Desabilitar stage-wise temporariamente**
 2. **Usar todas as camadas sempre ativas**
 3. **Validar formulação básica**
 4. **Reintroduzir stage-wise gradualmente**
-

10. ARQUIVOS PARA ANÁLISE ADICIONAL

10.1 Arquivos Críticos





1. `barragem_fenicsx_stagewise_correto.py` - Script principal com erro
2. `analise_stagewise_xdmf.json` - Dados de validação
3. `barragem1.yaml` - Configuração do problema
4. `barragem1.xdmf` - Malha e tags

10.2 Documentação Relevante

1. `DIAGNOSTICO_FINAL.md` - Análise prévia do problema
 2. `RESUMO_TECNICA_STAGEWISE_CORRETA.md` - Especificação da técnica
 3. `MUDANCAS_STAGEWISE.md` - Mudanças implementadas
-

11. CONCLUSÕES

11.1 Status Atual

-  **Projeto bem estruturado** com documentação técnica adequada
-  **Migração FEniCSx concluída** com sucesso
-  **Formulação física correta** implementada
-  **Bug crítico** na montagem da matriz impede execução

11.2 Prognóstico

Problema solucionável em 1-3 dias:

- Causa raiz identificada (nó 13 órfão)
- Solução técnica clara (garantir BC completo)
- Base de código sólida para implementação

11.3 Próximos Passos

1. **IMEDIATO:** Implementar correção para nó órfão
 2. **CURTO PRAZO:** Validar técnica stage-wise completa
 3. **MÉDIO PRAZO:** Implementar sistema robusto de validação
-

Relatório preparado para implementação das 3 etapas de validação conforme planejado.