

Como utilizar el WMA para acoplarlo a un código de transporte

- 1) Crear problema de transporte, con sus condiciones de frontera e iniciales, malla, propiedades, etc
- 2) Crear objeto químico:
 - a. hacer una instancia de la clase química (vamos a llamar al objeto `my_chem`)
 - b. `my_chem` llama a la subrutina `read_chemistry`
- 3) Pedir al objeto químico las concentraciones de las componentes acuosas para cada tipo de agua: `my_chem` llama a `get_aq_comps_wat_types`
- 4) Asignar el número de target waters: `my_chem` llama a `set_num_tar_wat`
- 5) Asignar los tipos de agua y de material a los targets waters y solids:
 - a. `my_chem` llama a `set_target_waters_wat_types`
 - b. `my_chem` llama a `set_target_solids_materials`
 - c. `my_chem` llama a `set_target_waters_target_solids`
- 6) Bucle de cálculo de mezcla reactiva:
 - a. Resolver transporte conservativo componentes (e.g. MODFLOW)
 - b. Añadir término reactivo (WMA): `my_chem` llama al solver de mezcla reactiva en cada paso de tiempo, que recibe la matriz de concentraciones después del transporte conservativo y la devuelve tras la mezcla reactiva
- 7) Escribir resultados: `my_chem` llama a `write_chemistry`