Para realizar las simulaciones se uso el programa LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), este código se caracteriza por hacer uso de las listas de vecinos [rapaport] para efecuar cálculos que permiten reducir la complejidad algorítmica.

Para todas los sistemas estudiados se configuró un arreglo bidimensional de individuos, ordenados inicialmente tipo red cuadrada separados