

---

## Graph Neural Networks for Physical Models of Collective Cell Migration

**Auteur** : Pirenne, Lize

**Promoteur(s)** : Louppe, Gilles

**Faculté** : Faculté des Sciences appliquées

**Diplôme** : Master en ingénieur civil en informatique, à finalité spécialisée en "intelligent systems"

**Année académique** : 2022-2023

**URI/URL** : <https://github.com/Pangasius/graph-displacement>; <http://hdl.handle.net/2268.2/18186>

---

*Avertissement à l'attention des usagers :*

*Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.*

*Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.*

---

# Graph Neural Networks for Physical Models of Collective Cell Migration

Université de Liège - Faculté des Sciences Appliquées

Travail de fin d'études réalisé en vue de l'obtention du grade de master Ingénieur Civil en informatique, à finalité spécialisée en "intelligent systems" par Pirene Lize.

Avec Louppe Gilles en tant que promoteur académique.

Avec Stillman Namid en tant que directeur de thèse.

Année académique 2022-2023

In this thesis, a graph neural network generates likely distributions of the set of points corresponding to the positions of cells after a discrete time step from a particular initial disposition. The predictions of this probabilistic program will be sampled to be used over and over again to simulate the trajectories of each cell. From this generated set of trajectories, summary statistics that reflect the expected behavior will be compared against the same statistics computed on 2D synthetic data generated from a cell migration simulator and then real, computer annotated, data coming from roaming neural crest cells in a dish. Finally, the mechanics of the model will be analyzed in order to collect an understanding of its decision processes, which will be compared to the known mechanics of the simulator.

It will be shown that it is possible to train a small and scalable model to produce accurate trajectories for most of the scenarios studied and that, with only a few real, computer annotated, samples, this model still offered interesting inference capabilities. The explainability of graph neural networks and attention layers will be leveraged to offer some insight on the decision processes.

The use of such models can contribute to improving automatic data annotation and provide alternate angles to study the mechanisms of cell migration.