Republic of Yemen
Ministry of Education and Scientific Research
University of Science and Technology
Deanship of Postgraduate Studies and Scientific Research

A Hybrid GNN-RL Framework for Drug Design

A Case Study on Type 2 Diabetes

A Thesis Submitted by

Aya Khaled Yahya Khorees

To the Council for Graduate Studies and Scientific Research, as part of the requirements for obtaining a master's degree in computing

Supervisor

Dr. Mohammed Nasser Abdullah Al-Dowail

Assistant Professor of Computing

University of Science and Technology

August, 2026 AD **Sana'a** **Safar, 1448AH**

Republic of Yemen
Ministry of Education and Scientific Research
University of Science and Technology
Deanship of Postgraduate Studies and Scientific Research



A Hybrid GNN-RL Framework for Drug Design: A Case Study on Type 2 Diabetes

Abstract

The sheer scale of the chemical space makes modern drug discovery an incredibly resource-intensive endeavor to optimize multiple pharmacological and safety constraints simultaneously. Even though the AI and ML have enabled computational support for specific tasks, most existing approaches focused on the isolated problems such as molecular property prediction or molecule generation. This study presents a modular end-to-end AI framework that integrates Graph Neural Networks (GNNs) with Reinforcement Learning (RL) for de novo drug design. In our methodology the Molecules are represented as graphs and encoded into embeddings using GNNs, which are then used as states for an RL agent to guide molecular optimization. The framework is applied to Type 2 Diabetes Mellitus (T2DM), targeting well-known proteins such as DPP-4, SGLT2, GLP-1, and PI3K, using publicly available datasets from ChEMBL and DrugBank. Evaluation Shifting the focus toward component interaction, system-level behavior, and full pipeline execution. The results confirm the feasibility of coupling GNN-based molecular representations with RL optimization in a unified and scalable framework, providing a strong foundation for future AI-driven drug discovery workflows.

Candidate
Aya Khaled Yahya Khorees

Supervisor
Dr. Mohammed N. A. Al-Dowail
Assistant Professor of Computing
University of Science and Technology

August, 2026AD **Sana'a** **Safar, 1448AH**

الجمهورية اليمنية
وزارة التربية والتعليم والبحث العلمي
جامعة العلوم والتكنولوجيا
عمادة الدراسات العليا والبحث العلمي



إطار هجين باستخدام GNN-RL لتصميم الأدوية: دراسة حالة على مرض السكري من النوع الثاني

المُلخص

تُعد عملية اكتشـــاف الأدوية من أكثر العمليات تعقيدًا واســـتهلاكًا للوقت والموارد، نظرًا لضـــخامة الحيز الكيميائي والحاجة إلى تحقيق توازن بين عدة خصـــائص دوائية وســـلامية في آنٍ واحد. وعلى الرغم من التقدم الملحوظ في تقنيات الذكاء الاصـطناعي وتعلّم الآلة، إلا أن معظم الدراسـات الحالية تركز على مهام منفصـــلة مثل التنبؤ بالخواص أو توليد الجزيئات، دون تقديم إطار متكامل يجمع هذه المراحل .تقترح هذه الدراسة إطارًا معياريًا قائمًا على الذكاء الاصطناعي يدمج بين الشبكات العصبية البيانية (GNN) والتعلّم التعزيزي (RL) لدعم تصميم الأدوية من الصفر. يتم تمثيل الجزيئات كرسوم بيانية واستخراج تضميناتها باستخدامGNN ، ثم تُستخدم هذه التمثيلات كمدخلات لوكيل تعلّم تعزيزي يقوم بتحسين الجزيئات بشكل موجّه وفق أهداف محددة. تم تطبيق الإطار على داء الســـكري من النوع الثاني، مع التركيز على أهداف جزيئية مثل DPP-4 وSGLT2، باســـتخدام بيانات من قواعد ChEMBL و .DrugBankوأظهرت النتائج إمكانية دمج هذه المكونات ضـــمن نظام موحّد قابل للتوسّـــع، مما يجعله أســـاسًـــا واعدًا للأبحاث المستقبلية في مجال اكتشاف الأدوية المعتمد على الذكاء الاصطناعي.

الطالب

اية خالد يحيى خريص

المشرف

د. محمد ناصر عبدالله الدويل

استاذ الحوسبة المساعد
جامعة العلوم والتكنولوجيا

أغسطس، 2026م **صنعاء** **صفر، 1448هـ**

الجمهورية اليمنية
وزارة التربية والتعليم والبحث العلمي
جامعة العلوم والتكنولوجيا
عمادة الدراسات العليا والبحث العلمي

إطار هجين باستخدام GNN-RL لتصميم الأدوية

دراسة حالة على مرض السكري من النوع الثاني

رسالة مقدمة من الطالبة

اية خالد يحيى خريص

إلى مجلس الدراسات العليا والبحث العلمي، وهي جزء من متطلبات الحصول على درجة الماجستير في الحوسبة

المشرف

د. محمد ناصر عبدالله الدويل
أستاذ الحوسبة المساعد
جامعة العلوم والتكنولوجيا

أغسطس، 2026م **صنعاء** **صفر، 1448هـ**