**实现目标：**

该代码通过酶及其底物经过predict.py使用training.py训练出来的模型能够预测酶及其底物的相互作用强度

**主要思路：**

底物：通过将底物的smiles序列分别经过ANN和GNN得到表征，在将二者经过注意力机制得出最终底物表征

酶：通过将酶序列分别经过n-gram处理及PSSM序列比对得到表征，再将二者经过注意力机制得出最终酶序列表征

最后结合酶表征和底物表征得到酶和底物的相互作用强度