

原子同學傳紙條

本課講 2017 年的一篇文章。Gilmer 等 5 位科學家讓電腦看懂分子：分子裡的每個原子像同學一樣，給旁邊的原子傳紙條。傳幾輪以後，電腦就能猜出整個分子的性質。

適合 10 歲左右

約 40 分鐘

需要：鉛筆、小紙條、5 位同伴

1 熱身：點和線的網

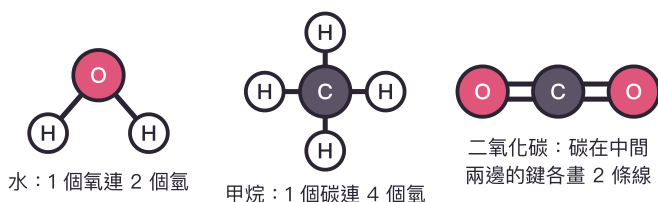
有一種「圖」不是圖片，而是用點和線畫成的一張網。點代表東西，線代表「這兩個連著」。請填一填：

地鐵線路圖：點是_____ 好朋友網：線是_____

今天的主角也是這樣一張網。它小得用眼睛看不見，它就是分子。

2 分子也是一張「圖」

水、空氣、你的書包，都是由極小極小的顆粒搭起來的。這種顆粒叫原子。幾個原子手拉手連在一起，就組成一個分子。原子之間的「手拉手」，叫化學鍵。把原子畫成點，化學鍵畫成線，分子就變成了一張點線網。科學家把它叫作圖。



O 是氧，H 是氫，C 是碳。二氧化碳裡，碳和每個氧都拉著 2 只「手」，所以畫 2 條線，叫雙鍵。

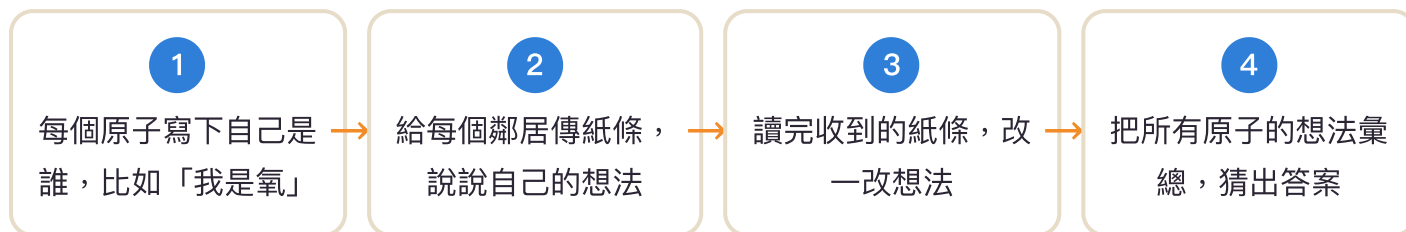
3 化學家的難題：算得準，可是太慢

化學家想知道分子的性質，比如它帶著多少能量，會不會溶在水裡。有一種電腦算法叫 DFT（密度泛函理論），算得很準，可是算一個分子要很久。要挑的分子太多，一個一個算實在等不起。

科學家的想法：讓電腦學會「快速猜」。先用 DFT 算好一大批分子，當作標準答案。再讓電腦看著分子圖猜性質，對照答案改正，這就是第 1 課講過的訓練。這篇文章的練習冊叫 QM9，有 13 萬多個小分子。每個分子最多有 9 個不算氫的原子，帶著 13 種性質的答案，比如能量多少、加熱時升溫快不快。

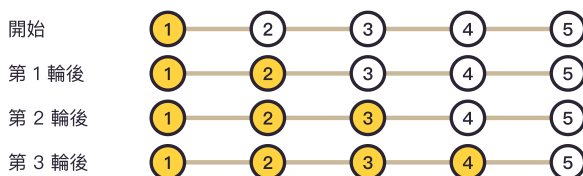
4 辦法：原子同學傳紙條

這篇文章的辦法很像傳紙條。每個原子是一個同學，化學鍵是同學之間的連線。規矩是：**紙條只能傳給和你連著線的同學**，他們叫你的**鄰居**。



🔄 第 2 步和第 3 步重複幾輪

這種沿著連線傳紙條的辦法，叫**消息傳遞**。為什麼要傳好幾輪？下圖中 5 個原子連成一排，1 號有一個秘密，黃色表示已經知道它（示意）：



每傳一輪，秘密往前走一步。傳 3 輪以後，每個原子都知道了 3 步以內的情況。

紙條怎麼寫，要看你們之間是什麼線

你給好朋友和給新同學寫紙條，寫法不一樣。這篇文章讓電腦**按連線是 1 條還是 2 條、原子離得多遠，決定紙條怎麼寫**。這是它效果最好的一招。

5 最後一步：彙總大家的想法

我們要的是**整個分子**的性質。所以最後要把所有原子的想法合成一個答案，這一步叫**讀出**，也就是「彙總」。

原子沒有先後順序，就像第 16 課的「一袋水果」。所以換了順序，彙總的答案也不能變。把大家的想法加在一起就行，像第 16 課的榨果汁。這篇文章效果最好的彙總辦法，正是第 16 課的「攤開多看幾眼」。

和第 19 課是一家人。第 19 課把東西兩兩配對比較，再把結果加起來。這就像每個同學都和所有同學連著線，傳一輪紙條再彙總。

6 這篇文章做成了什麼

第一件：統一說法。作者發現，以前 8 種處理圖的電腦程序其實都在傳紙條，只是 3 件事做法不同：**消息**（紙條寫什麼）、**更新**（讀完怎麼改想法）、**讀出**（怎麼彙總）。這樣就能比較哪種做法好。

第二件：拼出更好的版本。化學家給每種性質定了一條「夠用線」，叫**化學精度**。誤差小於它，結果就能拿來用。作者把每一步最好的做法拼在一起，QM9 的 13 種性質裡有 **11 種**達到了化學精度。把氫原子也畫進圖、告訴電腦原子離多遠，都能猜得更準。

7 這和今天有什麼關係

找新藥、找新材料。科學家先讓傳紙條的電腦快速猜一遍，留下有希望的分子，再做實驗確認。今天很多算分子、算材料的 AI 都用這個思路，比如 DeepMind 尋找新材料的 GNoME。

別的點線網。地圖上路口是點，馬路是線；社交網站上人是點，好友是線。傳紙條的辦法也被用來估計路上要走多久，或者推薦朋友。

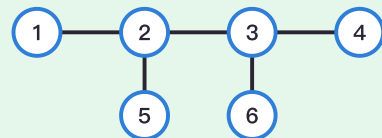
聊天 AI。第 13 課的 Transformer 裡，每個字都抬頭看所有的字。這就像每個字都和所有字連著線，互相傳紙條。

不是越多越好。輪數太多，大家的想法會越來越像，最後分不清誰是誰。

8 動手：傳紙條遊戲

玩法（6 個人，約 15 分鐘，全班可以分組玩）

- 在地上按右圖貼 6 個號碼，每人站一個號碼。**兩人之間有線，才是鄰居。**
- 每人偷偷在本子上寫一種動物，這是你的「秘密」。
- 傳一輪：**每人把自己知道的所有秘密抄在紙條上，給每個鄰居各傳一張。所有人同時傳。
- 讀完紙條，把新知道的秘密記進本子。數一數，你現在知道幾個人的秘密（算上自己），填進表裡。
- 一共傳 3 輪。



號碼	1	2	3	4	5	6
第 1 輪後知道幾個						
第 2 輪後知道幾個						
第 3 輪後知道幾個						

你會發現：傳幾輪，秘密就能走幾步遠。中間的 2 號和 3 號最先知道所有秘密，邊上的人要多等一輪。原子傳消息也是這樣一步一步傳開的。

9 動手：畫分子圖

玩法（1 到 2 個人，約 10 分鐘）

1. 照著說明，用圓點和線畫出每個分子。圓點裡寫 H、C、N 或 O（N 是氮）。
2. 數一數原子和線，填進表裡。
3. 檢查：氫有 1 只「手」，氧 2 只，氮 3 只，碳 4 只。每個原子的線數等於手數嗎？

分子和說明	畫在這裡	原子	線	容易溶在水裡嗎
甲烷：1 個碳連著 4 個氫				很難溶
氨：1 個氮連著 3 個氫				非常容易溶
過氧化氫：2 個氧連在一起，每個氧再連 1 個氫				能和水隨便混
酒精（乙醇）：2 個碳相連。第 1 個碳連 3 個氫；第 2 個碳連 2 個氫和 1 個氧；氧再連 1 個氫				能和水隨便混

找規律：容易溶在水裡的 3 個分子，圖裡都有什麼一樣的地方？_____

你會發現：它們都有 O 或 N 直接連著 H，就像水本身一樣，甲烷沒有。只看圖的樣子，你就找到了一條規律。傳紙條的電腦也是這樣，看過很多分子圖，自己總結規律。（這條規律很粗略，只對這幾個分子管用。）

10 詞語小卡片

圖

用點和線畫成的網。分子圖裡，原子是點，化學鍵是線。

消息傳遞（傳紙條）

每個點只給連著線的鄰居傳消息，傳幾輪，消息就走幾步遠。

讀出（彙總）

把所有點的想法合成一個答案，而且不管誰先誰後。

化學精度

化學家定的「夠用線」。誤差小於它，結果就能拿來用。

11 想一想

1. 傳紙條時，為什麼規定只能傳給連著線的鄰居？如果每個人都能傳給所有人，會有什麼好處和麻煩？

2. 畫一張你們班的「好朋友網」。如果要讓一個消息最快傳遍全班，你會讓誰第一個知道？為什麼？

3. 電腦猜出一個新分子可能是好藥，化學家還要不要做實驗？為什麼？

一句話記住：把分子畫成點和線，讓原子同學傳幾輪紙條，再把大家的想法彙總，就能猜出分子的性質。

給家長和老師：本課講的是 Justin Gilmer、Samuel S. Schoenholz、Patrick F. Riley、Oriol Vinyals、George E. Dahl 2017 年的論文 [Neural Message Passing for Quantum Chemistry](#) (ICML 2017)。論文提出消息傳遞神經網絡 (MPNN) 框架，用消息函數、更新函數、讀出函數三部分描述圖神經網絡，並把此前 8 種模型寫成它的特例。最佳組合是邊網絡消息函數、GRU 更新和 Set2Set 讀出 (來自第 16 天的論文)。在 QM9 (約 13.4 萬個最多含 9 個重原子的有機小分子，13 個 DFT 計算的性質) 上，13 個目標中有 11 個達到化學精度；輸入原子間距離、顯式加入氫原子都明顯降低了誤差。

「傳紙條」「改想法」「彙總」「紙條看連線寫」分別對應消息函數、更新函數、讀出函數和邊網絡。「幾隻手」是化合價的簡化說法。五原子傳播圖、六人站位圖和活動步驟都是示意；畫分子圖活動裡「O 或 N 連著 H 就易溶」是對氫鍵與極性的粗略簡化，不是論文內容。講義沒有寫 DFT 與 MPNN 的具體耗時。想深入可看本站的 [第 21 天中文導讀](#)，代碼見開源項目 [30u30 第 21 天目錄](#) (英文)。

極客教育 jikejiao.com 原創講義 · 2026-10