

原子同学传纸条

本课讲 2017 年的一篇文章。Gilmer 等 5 位科学家让电脑看懂分子：分子里的每个原子像同学一样，给旁边的原子传纸条。传几轮以后，电脑就能猜出整个分子的性质。

适合 10 岁左右

约 40 分钟

需要：铅笔、小纸条、5 位同伴

1 热身：点和线的网

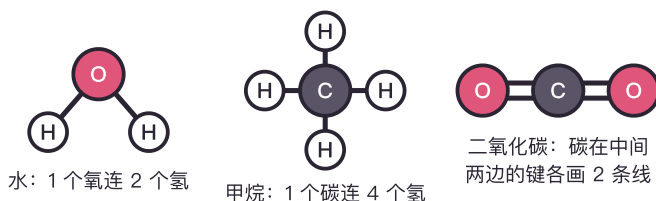
有一种“图”不是图片，而是用**点和线**画成的一张网。点代表东西，线代表“这两个连着”。请填一填：

地铁线路图：点是_____ 好朋友网：线是_____

今天的主角也是这样一张网。它小得用眼睛看不见，它就是**分子**。

2 分子也是一张“图”

水、空气、你的书包，都是由极小极小的颗粒搭起来的。这种颗粒叫**原子**。几个原子手拉手连在一起，就组成一个**分子**。原子之间的“手拉手”，叫**化学键**。把原子画成点，化学键画成线，分子就变成了一张点线网。科学家把它叫作**图**。



O 是氧，H 是氢，C 是碳。二氧化碳里，碳和每个氧都拉着 2 只“手”，所以画 2 条线，叫**双键**。

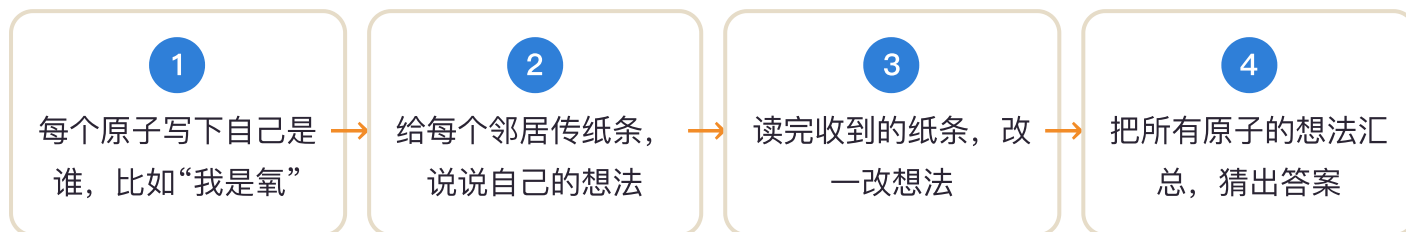
3 化学家的难题：算得准，可是太慢

化学家想知道分子的**性质**，比如它带着多少能量，会不会溶在水里。有一种电脑算法叫 **DFT**（密度泛函理论），算得很准，可是算一个分子要很久。要挑的分子太多，一个一个算实在等不起。

科学家的想法：让电脑学会“快速猜”。先用 DFT 算好一大批分子，当作**标准答案**。再让电脑看着分子图猜性质，对照答案改正，这就是第 1 课讲过的**训练**。这篇文章的练习册叫 **QM9**，有 13 万多个小分子。每个分子最多有 9 个不算氢的原子，带着 13 种性质的答案，比如能量多少、加热时升温快不快。

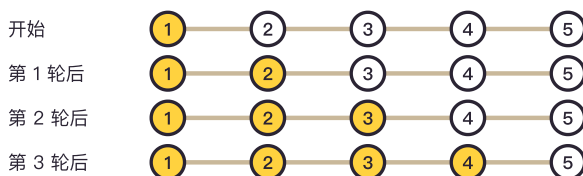
4 办法：原子同学传纸条

这篇文章的办法很像传纸条。每个原子是一个同学，化学键是同学之间的连线。规矩是：**纸条只能传给和你连着线的同学**，他们叫你的**邻居**。



🔄 第 2 步和第 3 步重复几轮

这种沿着连线传纸条的办法，叫**消息传递**。为什么要传好几轮？下图中 5 个原子连成一排，1 号有一个秘密，黄色表示已经知道它（示意）：



每传一轮，秘密往前走一步。传 3 轮以后，每个原子都知道了 3 步以内的情况。

纸条怎么写，要看你们之间是什么线

你给好朋友和给新同学写纸条，写法不一样。这篇文章让电脑**按连线是 1 条还是 2 条、原子离得有多远，决定纸条怎么写**。这是它效果最好的一招。

5 最后一步：汇总大家的想法

我们要的是**整个分子**的性质。所以最后要把所有原子的想法合成一个答案，这一步叫**读出**，也就是“汇总”。

原子没有先后顺序，就像第 16 课的“一袋水果”。所以换了顺序，汇总的答案也不能变。把大家的想法加在一起就行，像第 16 课的榨果汁。这篇文章效果最好的汇总办法，正是第 16 课的“摊开多看几眼”。

和第 19 课是一家人。第 19 课把东西两两配对比较，再把结果加起来。这就像每个同学都和所有同学连着线，传一轮纸条再汇总。

6 这篇文章做成了什么

第一件：统一说法。作者发现，以前 8 种处理图的电脑程序其实都在传纸条，只是 3 件事做法不同：**消息**（纸条写什么）、**更新**（读完怎么改想法）、**读出**（怎么汇总）。这样就能比较哪种做法好。

第二件：拼出更好的版本。化学家给每种性质定了一条“够用线”，叫**化学精度**。误差小于它，结果就能拿来用。作者把每一步最好的做法拼在一起，QM9 的 13 种性质里有 **11 种**达到了化学精度。把氢原子也画进图、告诉电脑原子离多远，都能猜得更准。

7 这和今天有什么关系

找新药、找新材料。科学家先让传纸条的电脑快速猜一遍，留下有希望的分子，再做实验确认。今天很多算分子、算材料的 AI 都用这个思路，比如 DeepMind 寻找新材料的 GNoME。

别的点线网。地图上路口是点，马路是线；社交网站上人是点，好友是线。传纸条的办法也被用来估计路上要走多久，或者推荐朋友。

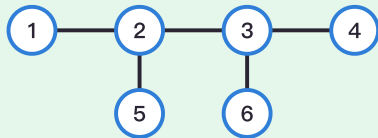
聊天 AI。第 13 课的 Transformer 里，每个字都抬头看所有的字。这就像每个字都和所有字连着线，互相传纸条。

不是越多越好。轮数太多，大家的想法会越来越像，最后分不清谁是谁。

8 动手：传纸条游戏

玩法（6 个人，约 15 分钟，全班可以分组玩）

- 在地上按右图贴 6 个号码，每人站一个号码。**两人之间有线，才是邻居。**
- 每人偷偷在本子上写一种动物，这是你的“秘密”。
- 传一轮：**每人把自己知道的所有秘密抄在纸条上，给每个邻居各传一张。所有人同时传。
- 读完纸条，把新知道的秘密记进本子。数一数，你现在知道几个人的秘密（算上自己），填进表里。
- 一共传 3 轮。



号码	1	2	3	4	5	6
第 1 轮后知道几个						
第 2 轮后知道几个						
第 3 轮后知道几个						

你会发现：传几轮，秘密就能走几步远。中间的 2 号和 3 号最先知道所有秘密，边上的人要多等一轮。原子传消息也是这样一步一步传开的。

9 动手：画分子图

玩法（1 到 2 个人，约 10 分钟）

1. 照着说明，用圆点和线画出每个分子。圆点里写 H、C、N 或 O（N 是氮）。
2. 数一数原子和线，填进表里。
3. 检查：氢有 1 只“手”，氧 2 只，氮 3 只，碳 4 只。每个原子的线数等于手数吗？

分子和说明	画在这里	原子	线	容易溶在水里吗
甲烷：1 个碳连着 4 个氢				很难溶
氨：1 个氮连着 3 个氢				非常容易溶
过氧化氢：2 个氧连在一起，每个氧再连 1 个氢				能和水随便混
酒精（乙醇）：2 个碳相连。第 1 个碳连 3 个氢；第 2 个碳连 2 个氢和 1 个氧；氧再连 1 个氢				能和水随便混

找规律：容易溶在水里的 3 个分子，图里都有什么一样的地方？ _____

你会发现：它们都有 O 或 N 直接连着 H，就像水本身一样，甲烷没有。只看图的样子，你就找到了一条规律。传纸条的电脑也是这样，看过很多分子图，自己总结规律。（这条规律很粗略，只对这几个分子管用。）

10 词语小卡片

图

用点和线画成的网。分子图里，原子是点，化学键是线。

消息传递（传纸条）

每个点只给连着线的邻居传消息，传几轮，消息就走几步远。

读出（汇总）

把所有点的想法合成一个答案，而且不管谁先谁后。

化学精度

化学家定的“够用线”。误差小于它，结果就能拿来用。

11 想一想

1. 传纸条时，为什么规定只能传给连着线的邻居？如果每个人都能传给所有人，会有什么好处和麻烦？

2. 画一张你们班的“好朋友网”。如果要让一个消息最快传遍全班，你会让谁第一个知道？为什么？

3. 电脑猜出一个新分子可能是好药，化学家还要不要做实验？为什么？

一句话记住：把分子画成点和线，让原子同学传几轮纸条，再把大家的想法汇总，就能猜出分子的性质。

给家长和老师：本课讲的是 Justin Gilmer、Samuel S. Schoenholz、Patrick F. Riley、Oriol Vinyals、George E. Dahl 2017 年的论文 [Neural Message Passing for Quantum Chemistry](#) (ICML 2017)。论文提出消息传递神经网络 (MPNN) 框架，用消息函数、更新函数、读出函数三部分描述图神经网络，并把此前 8 种模型写成它的特例。最佳组合是边网络消息函数、GRU 更新和 Set2Set 读出（来自第 16 天的论文）。在 QM9（约 13.4 万个最多含 9 个重原子的有机小分子，13 个 DFT 计算的性质）上，13 个目标中有 11 个达到化学精度；输入原子间距离、显式加入氢原子都明显降低了误差。

“传纸条”“改想法”“汇总”“纸条看连线写”分别对应消息函数、更新函数、读出函数和边网络。“几只手”是化合价的简化说法。五原子传播图、六人站位图和活动步骤都是示意；画分子图活动里“O 或 N 连着 H 就易溶”是对氢键与极性的粗略简化，不是论文内容。讲义没有写 DFT 与 MPNN 的具体耗时。想深入可看本站的 [第 21 天中文导读](#)，代码见开源项目 [30u30 第 21 天目录](#)（英文）。

极客教育 jikejiao.com 原创讲义 · 2026-10