

21. 1stOpt v.s. Baron/Lingo – 谁是全局最优化求解器之王？

21.1 背景介绍

优化问题及对应的算法大致可分为线性规划、二次规划、非线性规划及全局最优化四类，国外某研究优化算法的网站用下图来表示：

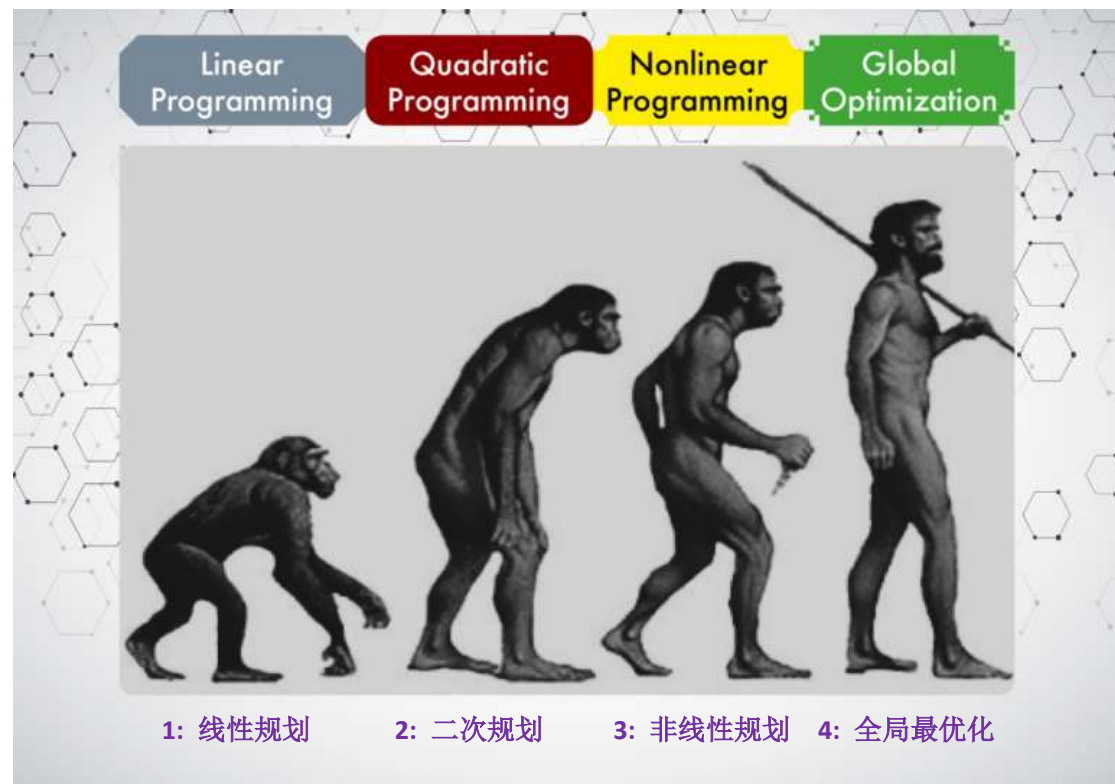


图 21.1 优化算法与进化论

其想表达的意义不言而喻：全局最优化是优化算法进阶的最高境界。此论点从理论上看没有任何问题，无论线性规划也好、二次规划或非线性规划也罢，都可以视作全局最优化的特例，但在现实具体操作中，至少在人类目前的算力前提下，全局最优化仅适合于中小规模优化问题，而对大规模线性规划问题，却无能为力或效果很差，正应了古语“尺有所短，寸有所长”，杀鸡真不能用宰牛刀，从这层意义来说，下图的比喻更恰当些，算法没有高低贵贱之分，不同的场景用最恰当的工具，能正确解决问题才是最终目的。



1: 线性规划

2: 二次规划

3: 非线性规划

4: 全局最优化

图 21.2 优化算法与进化论

无论何种比喻，有一点是毋庸置疑的：全局最优化是至今尚未解决的科学难题，不管是从理论还是到实践，没有任何一种优化算法能保证对任何优化问题得到全局最优解，即使对只有几个变量的低维度优化问题。

明知山有虎偏向虎山行，正是因为全局最优化的挑战性，无数研究者投入其中，涌现出了众多全局最优化算法，也诞生了一些优秀的全局优化求解器，在这些都称自家产品是当今业界同类最高水准产品中，哪款产品才是真正的全局最优化求解器之王？实践出真知，今年又恰逢是中国农历虎年，虎是名副其实的“森林之王”，在此选择两款业界公认及用户众多的产品 **Baron** 和 **Lingo**，与 **1stOpt** 进行实战验证，看看谁是真正的全局最优化求解器之王。



图 21.3 你我他 - 谁是“森林之王”

Baron 是美国工程院院士、卡内基梅隆大学 **Nick Sahinidis** 博士开发的优化求解器，在全局最优化方面成绩斐然，被公认为业界顶尖，详见：<https://minlp.com/home>，可以免费下载试用版，试用版有求解规模限制，安装后命令行（CMD）执行，附带有演示案例。看该网页团队介绍，除了一号人物 **Nick Sahinidis** 博士，二号人物是毕业于浙江大学、曾在阿里巴巴工作过的 **Yi Zhang** 博士，国人还是很强的啊。

Lingo 就不用细说了，国内知名度远高于 Baron，用户也更多，被称为国内每年数学建模比赛的必备“神器”，官方网站（<https://www.lindo.com/>）可以申请免费试用版，试用版同样有求解规模限制。

三种求解器均使用缺省设置，Lingo 计算时启用“Use Global Solver”选项。

21.2 测试案例及求解代码

选取了极其普通的 6 道测试题，无约束，参数范围自由，求解规模（求解参数数）都很小，最大不超过 5 个，满足 Baron 和 Lingo 试用版的参数限制要求。

六道题中前三组实际上是非线性方程组求解问题，后三组则是非线性拟合问题，无论是方程组问题还是拟合问题，最终都转换成最优化问题。

方程组问题：

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_k(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \Rightarrow \text{Min. } f_1^2 + f_2^2 + \dots f_k^2$$

拟合问题（最小二乘目标函数）：

$$\text{Min. } \sum_{i=1}^n (y'_i - y_i)^2$$

其中， y' 、 y 分别代表计算和实际因变量值。

案例 1. 四元非线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 \cdot \left(1 - \exp\left(x_1 - (x_3 \cdot (0)^{x_4})\right)\right) - 51.61 = 0 \\ x_1 + x_2 \cdot \left(1 - \exp\left(x_1 - (x_3 \cdot (9.78)^{x_4})\right)\right) - 51.91 = 0 \\ x_1 + x_2 \cdot \left(1 - \exp\left(x_1 - (x_3 \cdot (30.68)^{x_4})\right)\right) - 53.27 = 0 \\ x_1 + x_2 \cdot \left(1 - \exp\left(x_1 - (x_3 \cdot (59.7)^{x_4})\right)\right) - 59.68 = 0 \end{cases} \quad (21-1)$$

代码 21-1

1stOpt	MinFunction (x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(0)^x4)))-51.61)^2+(x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(9.78)^x4)))-51.91)^2+(x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(30.68)^x4)))-53.27)^2+(x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(59.7)^x4)))-59.68)^2;
Baron	VARIABLES x1,x2,x3,x4; OBJ: minimize (x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(0)^x4)))-51.61)^2+(x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(9.78)^x4)))-51.91)^2+(x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(30.68)^x4)))-53.27)^2+(x1+x2*(1-exp(x1-(x3*(59.7)^x4)))-59.68)^2;
Lingo	min=(x1+x2*(1-@exp(x1-(x3*(0)^x4)))-51.61)^2+(x1+x2*(1-@exp(x1-(x3*(9.78)^x4)))-51.91)^2+(x1+x2*(1-@exp(x1-(x3*(30.68)^x4)))-53.27)^2+(x1+x2*(1-@exp(x1-(x3*(59.7)^x4)))-59.68)^2;

	51.91)^2+(x1+x2*(1-@exp(x1-(x3*(30.68)^x4)))-53.27)^2+(x1+x2*(1-@exp(x1-(x3*(59.7)^x4)))-59.68)^2; @Free(x1);@Free(x2);@Free(x3);@Free(x4);
--	--

案例 2. 三元非线性方程组

$$\begin{cases} \frac{1.0}{x_1^2 \cdot x_2 \cdot x_3} - 0.0292 = 0 \\ \frac{1.0}{x_1 \cdot x_2} + \frac{2-502}{x_1^2 \cdot x_3} + \frac{3-5028}{x_2 \cdot x_3 \cdot x_1} - 6.17 = 0 \\ \frac{2.0}{x_2} + \frac{2-502}{x_3 \cdot x_1} + \frac{1.0}{x_1} - 7.86 = 0 \end{cases} \quad (21-2)$$

代码 21-2

1stOpt	MinFunction (1.0/(x1^2*x2*x3)-0.0292)^2+(1.0/(x1*x2)+(2-5028)/(x1^2*x3)+(3-5028)/(x2*x3*x1)-6.17)^2+(2.0/x2+(2-5028)/(x3*x1)+1.0/x1-7.86)^2;
Baron	VARIABLES x1,x2,x3; OBJ: minimize (1.0/(x1^2*x2*x3)-0.0292)^2+(1.0/(x1*x2)+(2-5028)/(x1^2*x3)+(3-5028)/(x2*x3*x1)-6.17)^2+(2.0/x2+(2-5028)/(x3*x1)+1.0/x1-7.86)^2;
Lingo	min = (1.0/(x1^2*x2*x3)-0.0292)^2+(1.0/(x1*x2)+(2-5028)/(x1^2*x3)+(3-5028)/(x2*x3*x1)-6.17)^2+(2.0/x2+(2-5028)/(x3*x1)+1.0/x1-7.86)^2; @Free(x1);@Free(x2);@Free(x3);

案例 3. 三元非线性方程组

$$\begin{cases} x_1 \cdot \exp(-x_2 \cdot 7.85) + x_3 \cdot \exp(-x_4 \cdot 7.85) - (28.9) = 0 \\ -\frac{x_1}{x_2} \cdot \exp(-x_2 \cdot 7.85) - \frac{x_3}{x_4} \cdot \exp(-x_4 \cdot 7.85) - (500) = 0 \\ \frac{x_1}{x_2^2} \cdot \exp(-x_2 \cdot 7.85) + \frac{x_3}{x_4^2} \cdot \exp(-x_4 \cdot 7.85) - (233) = 0 \\ x_1 \cdot \exp(-x_2 \cdot 15.85) + x_3 \cdot \exp(-x_4 \cdot 18.5) - (20.9) = 0 \end{cases} \quad (21-3)$$

代码 21-3

1stOpt	MinFunction (x1*exp(-x2*7.85)+x3*exp(-x4*7.85)-(28.9))^2+(-x1/x2*exp(-x2*7.85)-x3/x4*exp(-x4*7.85)-(500))^2+(x1/x2^2*exp(-x2*7.85)+x3/x4^2*exp(-x4*7.85)-(233))^2+(x1*exp(-x2*15.85)+x3*exp(-x4*18.5)-(20.9))^2;
Baron	VARIABLES x1,x2,x3,x4; OBJ: minimize (x1*exp(-x2*7.85)+x3*exp(-x4*7.85)-(28.9))^2+(-x1/x2*exp(-x2*7.85)-x3/x4*exp(-x4*7.85)-(500))^2+(x1/x2^2*exp(-x2*7.85)+x3/x4^2*exp(-x4*7.85)-(233))^2+(x1*exp(-x2*15.85)+x3*exp(-x4*18.5)-(20.9))^2;
Lingo	min = (x1*@exp(-x2*7.85)+x3*@exp(-x4*7.85)-(28.9))^2+(-x1/x2*@exp(-x2*7.85)-x3/x4*@exp(-x4*7.85)-(500))^2+(x1/x2^2*@exp(-x2*7.85)+x3/x4^2*@exp(-x4*7.85)-(233))^2+(x1*@exp(-x2*15.85)+x3*@exp(-x4*18.5)-(20.9))^2; @Free(x1);@Free(x2);@Free(x3);@Free(x4);

案例 4. 五参数拟合问题

拟合公式：

$$y = \frac{b_1}{1+b_2 \cdot \exp(b_3 \cdot x)+b_4 \cdot x^{b_5}} \quad (21-4)$$

表 21.1 数据:

x	1,3,6,9,12,15,18,21
y	5.3,9.6,23.2,50.2,92,131.7,203.2,281.4

代码 21-4

1stOpt	Constant x=[1,3,6,9,12,15,18,21], y=[5.3,9.6,23.2,50.2,92,131.7,203.2,281.4]; MinFunction Sum(x,y)((b1/(1+b2*exp(b3*x)+b4*x^b5)-y)^2);
Baron	VARIABLES b1,b2,b3,b4,b5; OBJ: minimize (b1/(1+b2*exp(b3*1)+b4*1^b5)-5.3)^2+(b1/(1+b2*exp(b3*3)+b4*3^b5)-9.6)^2+(b1/(1+b2*exp(b3*6)+b4*6^b5)-23.2)^2+(b1/(1+b2*exp(b3*9)+b4*9^b5)-50.2)^2+(b1/(1+b2*exp(b3*12)+b4*12^b5)-92)^2+(b1/(1+b2*exp(b3*15)+b4*15^b5)-131.7)^2+(b1/(1+b2*exp(b3*18)+b4*18^b5)-203.2)^2+(b1/(1+b2*exp(b3*21)+b4*21^b5)-281.4)^2;
Lingo	Sets: Dat/1..8/:x,y; Par/1..5/:b; EndSets Data: x=1,3,6,9,12,15,18,21; y=5.3,9.6,23.2,50.2,92,131.7,203.2,281.4; EndData Min = @Sum(Dat: (b(1)/(1+b(2)*@exp(b(3)*x)+b(4)*x^b(5))-y)^2); @For(Par: @Free(b));

案例 5. 四参数拟合问题

拟合公式:

$$y = b_1 \cdot (1 - \exp(-b_2 \cdot (b_3 + x \cdot \exp(b_4 \cdot x))^2))$$

(21-5)

表 21.2 数据:

x	0,80,100,120,150
y	2195,4265,4824,5143.5,5329

代码 21-5

1stOpt	Constant x=[0,80,100,120,150], y=[2195,4265,4824,5143.5,5329]; ConstStr f=b1*(1-exp(-b2*(b3+x*exp(b4*x))^2)); Parameter b(4); Plot x[x],y,f; MinFunction Sum(x,y)((f-y)^2);
Baron	VARIABLES b1,b2,b3,b4,b5; OBJ: minimize (b1*(1-exp(-b2*(b3+0*exp(b4*0))^2))-2195)^2+(b1*(1-exp(-b2*(b3+80*exp(b4*80))^2))-4265)^2+(b1*(1-exp(-

	$b2*(b3+100*\exp(b4*100))^2)-4824)^2+(b1*(1-\exp(-b2*(b3+120*\exp(b4*120))^2))-5143.5)^2+(b1*(1-\exp(-b2*(b3+150*\exp(b4*150))^2))-5329)^2;$
Lingo	Sets: Dat/1..5/:x,y; Par/1..5/:b; EndSets Data: x=0,80,100,120,150; y=2195,4265,4824,5143.5,5329; EndData Min = @Sum(Dat: (b(1)*(1-@exp(-b(2)*(b(3)+x*@exp(b(4)*x))^2))-y)^2); @For(Par: @Free(b));

案例 6. 五参数拟合问题

拟合公式：

$$y = b_1 + b_2 \cdot \exp(-0.5 \cdot ((x - b_3) \cdot b_4) \cdot x^{b_5}) \quad (21-6)$$

表 21.3 数据：

x	1,2,15,22,31,42,49,57
y	79,163,20584,70601,194743,406816,510589,599586

代码 21-6

1stOpt	Constant x=[1,2,15,22,31,42,49,57], y=[79,163,20584,70601,194743,406816,510589,599586]; ConstStr f=b1+b2*exp(-0.5*((x-b3)*b4)*x^b5); Plot x[x],y,f; MinFunction Sum(x,y)((f-y)^2);
Baron	VARIABLES b1,b2,b3,b4,b5; OBJ: minimize (b1+b2*exp(-0.5*((1-b3)*b4)*1^b5)-79)^2+(b1+b2*exp(-0.5*((2-b3)*b4)*2^b5)-163)^2+(b1+b2*exp(-0.5*((15-b3)*b4)*15^b5)-20584)^2+(b1+b2*exp(-0.5*((22-b3)*b4)*22^b5)-70601)^2+(b1+b2*exp(-0.5*((31-b3)*b4)*31^b5)-194743)^2+(b1+b2*exp(-0.5*((42-b3)*b4)*42^b5)-406816)^2+(b1+b2*exp(-0.5*((49-b3)*b4)*49^b5)-510589)^2+(b1+b2*exp(-0.5*((57-b3)*b4)*57^b5)-599586)^2;
Lingo	Sets: Dat/1..8/:x,y; Par/1..5/:b; EndSets Data: x=1,2,15,22,31,42,49,57; y=79,163,20584,70601,194743,406816,510589,599586; EndData Min = @Sum(Dat: (b(1)+b(2)*@exp(-0.5*((x-b(3))*b(4))*x^b(5))-y)^2);

@For(Par: @Free(b));

21.3 测试结果对比

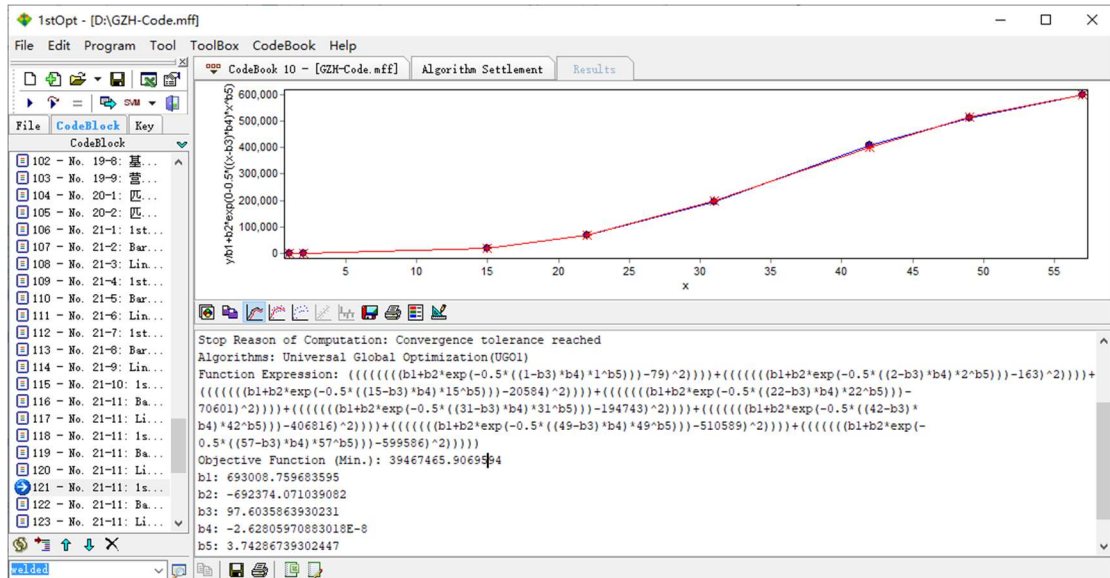


图 21.4 1stOpt 运行界面（案例 6）

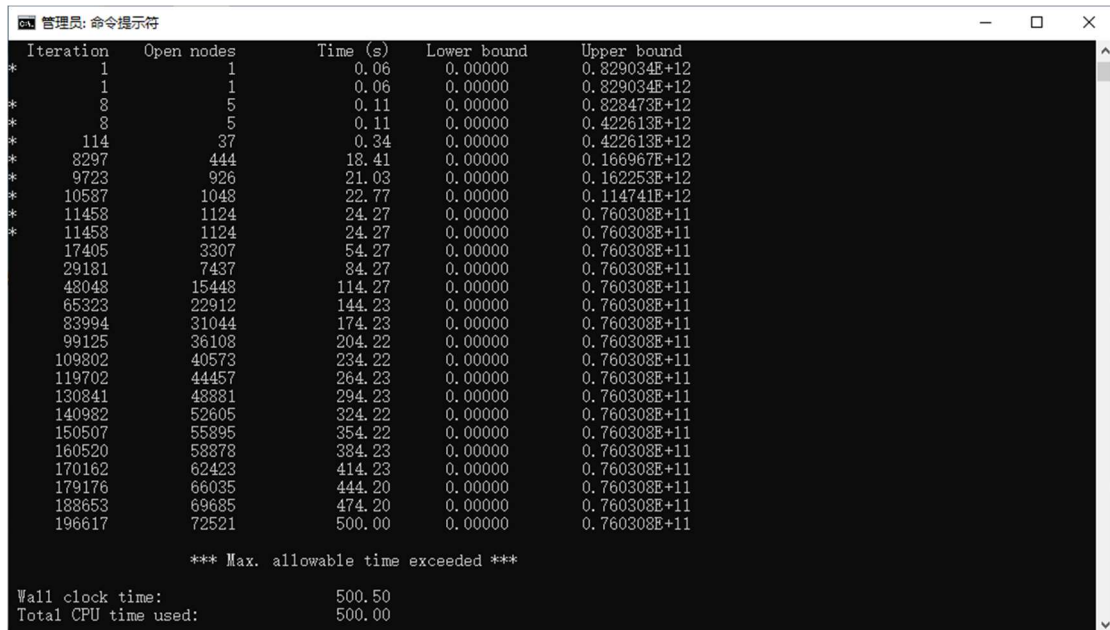


图 21.5 Baron 运行界面（案例 6）

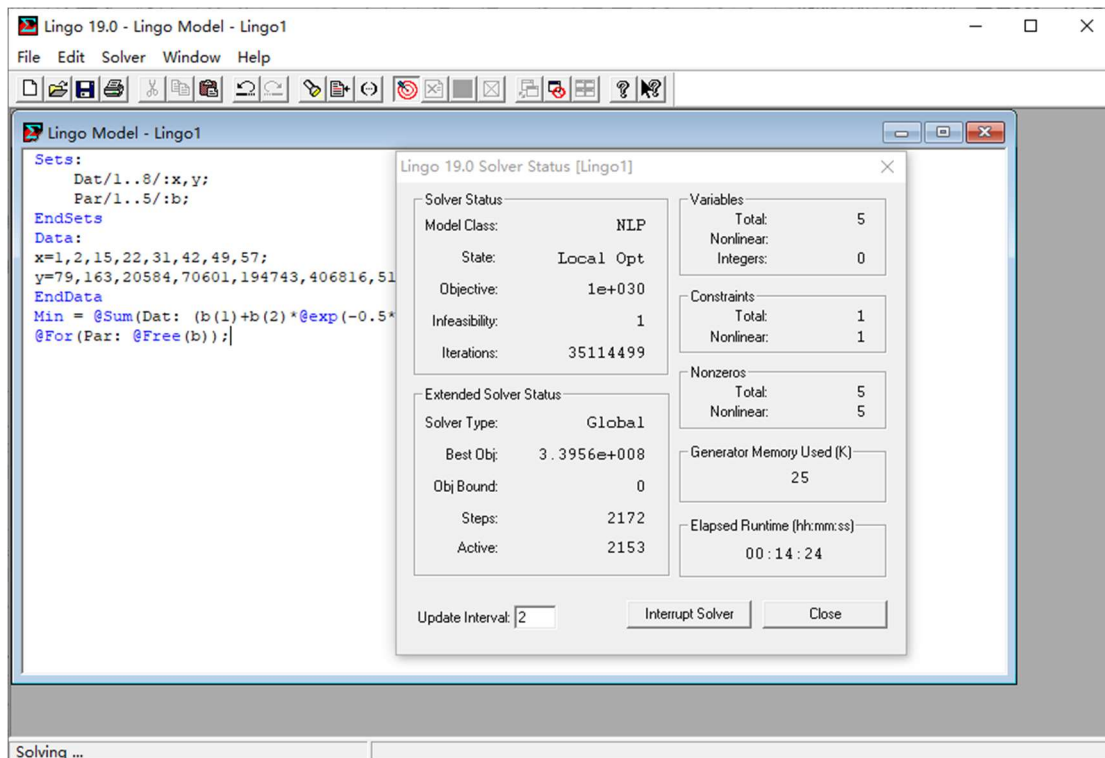


图 21.6 Lingo 运行界面（案例 6）

表 21.4 案例 1 至案例 3 结果

案例	求解器	目标函数值	参数值	时间（s）
1	1stOpt	3.31384689065243E-23	x1: 51.1447778118045 x2: -2.85604889271857E-23 x3: -0.0537307155917353 x4: 0.976132921548582	2.0
	Baron	1.00193889658444734	x1: -0.297065175288340 x2: 205.19360031336955 x3: 4.11836589248942e-08 x4: 3.4235425211167567	373.3
	Lingo	2.067250347590230E-02	x1: 0.52655874679150E-05 x2: -9818927.865148257 x3: 0.0000000000000000 x4: 2.426163090872998	7.0
2	1stOpt	3.15574454743786E-30	x1: 0.137933869865434 x2: -0.32975496563992 x3: -5458.62762032179 或 x1: 0.149818369792421 x2: -0.329754082612954 x3: -4626.97159302453	1.0
	Baron	0.13111657388784E-04	x1: 0.174143666199288 x2: -0.349598074990797 x3: -3681.901330737498	30.84
	Lingo	0.8526184713249528E-03	x1: -3331.561531660097 x2: 0.3514317281900805 x3: 0.6954343796360525	2.0
3	1stOpt	6.72374750460848E-22	x1: 184.069843108885 x2: -0.0300532472870502	3.5

			x3: -163.682244597173 x4: -0.0281408465204965	
	Baron	204630.63768683356465	x1: -23.737189339961297 x2: 2.62888570049225744 x3: 2.45768970355532578 x4: -0.1953337450639880	8.36
	Lingo	305561.0200000179	x1: 1.049177895822427 x2: 3.059765149832888 x3: 1.049176534335488 x4: 3.059780231627593	2.0

表 21.5 案例 4 至案例 6 结果

案例	求解器	目标函数值	参数值	时间 (s)
4	1stOpt	53.9603787386462	b1: -1026.62715287643 b2: 4149.90879430962 b3: -1.52092047955974 b4: -1100.98425640174 b5: -1.79632329401526	1.5
	Baron	81.475417338346105	b1: 1682.686058378245 b2: 90.17685490484639 b3: -0.18738824711586 b4: 824.3798680757950 b5: -1.82181154488073	123
	Lingo	78.211414355646610	b1: -796.130113103910 b2: 2061.121327511277 b3: -131878.216985006 b4: -725.776298124389 b5: -1.72333611945914	3.0
5	1stOpt	486.303333632765	b1: 5334.13480822052 b2: 1.28367844276855E-5 b3: 203.202062883217 b4: 0.00796475208234289	1.0
	Baron	3827285.6373798139	b1: 10436.416489583209 b2: 2.0075252081026e-05 b3: 82.545971799810388 b4: 0	80.0
	Lingo	6464000.8000000548	b1: 4351.30000000000 b2: 128.973155958058 b3: 256.711744116116 b4: 1.23456780000000	1.0
6	1stOpt	39467465.9069593	b1: 693009.017037375 b2: -692374.323451058 b3: 97.6034475011618 b4: -2.62805481182777E-8 b5: 3.74286840372989	3.0
	Baron	76030760216.84008	b1: 498195.00990896683 b2: -12031358297064.77 b3: -275.4888133673362 b4: 0.1236925081781414 b5: -0.0149139347921601	27.6
	Lingo	339559753.89956278	b1: 5448.942696919424 b2: 0.5508944446506E-08 b3: 3.43371351197433 b4: -78.9545521871457 b5: -1.03413603964556	29.7

Baron 试用版缺省计算时间是 500 秒，也即每个问题都会计算到 500 秒时才停止，不论目标函数是否早已没有任何改进，上表中的计算时间是其达到最好结果的时间；Lingo 如果不人工手动终止，会一直处于计算状态，那怕结果完全稳定。1stOpt 会在结果没有改进的时候自动停止计算。

案例 1 至案例 3 为方程组问题，理论上各自的目标函数值应该趋近于 0 才表明结果正确。案例 1 问题，1stOpt 每次都能得到满足方程的稳定唯一解且用时最少，Baron 和 Lingo 结果都不对，且两者计算时间均较长，尤其是 Baron，超百倍 1stOpt 的计算时间；案例 2 问题，1stOpt 可以轻松得到两组高精度解，而 Baron 和 Lingo 仅得到低精度近似解，同时耗时也更多；案例 3 问题，Baron 和 Lingo 所得结果，与 1stOpt 的相比，更是有天壤地别之差。

案例 4 至案例 6 是非线性拟合问题，最小二乘目标函数值越小越好。案例 4 中 1stOpt 结果最好，Lingo 次之，Baron 最差；案例 5，Baron 的目标函数值是 1stOpt 的 7870 倍，而 Lingo 又是 Baron 的近 2 倍；案例 6，Baron 结果分别是 1stOpt 和 Lingo 的 1926 和 8.6 倍。

就这 6 道案例题而言，1stOpt 结果无疑是最好的，效率也是最高，Baron 整体上比 Lingo 还要稍差一些。

21.4 小结

通过前述实际测试对比，谁是全局最优化求解器之王，相信已有初步结论。当然，因为非线性全局最优化问题的复杂性和多样性，很难通过小样本问题测试就得出最终不变结论，而是需要更多的实际问题去对比检验。

对于任何一款优化求解器，在保证求解效果的基础上，软件的易用性对终端普通用户而言也是需要考虑的非常重要的一点，比如 Baron 没有通用的 UI 用户界面，只能在 CMD 窗口命令行调用，非计算机专业或对电脑不是很熟悉的普通用户就会感到“老虎吃天，无从下口”，此外 Baron 支持的数学函数也非常有限，不要说一些如贝塞尔、伽马等特殊函数，连普通的三角函数如 $\sin()$ 、 $\cos()$ 等都不支持，这显然会严重影响该软件的应用场景；Lingo 的语法略显抽象，不是很直观，尤其是代码中数学函数前需加“@”符号，给人以浓浓的上世纪九十年代电子表格霸主软件 Lotus 1-2-3 的复古气息。

不知是否由于使用的是试用版的原因，**Baron** 的表现不及预期，比其宣传的效果有相当差距。

虎年闻呼啸，希望出现更多更好的全局优化求解器，“虎王”之争越激烈，科技越进步，越能造福于人类。