

Supplementary Materials

FIND: a forward–inverse navigation and discovery platform for hydrogen storage alloys powered by data-driven machine learning

Xuao Lu^{1,2}, Shiwen Luo^{1,2}, Jiongyang Li³, Minjie Chen⁴, Tongao Yao^{1,2}, Zhuoran Xu^{1,2}, Yujie Yan^{1,2}, Jun Li^{1,2}, Xuqiang Shao³, Zhengyang Gao^{1,2}, Weijie Yang^{1,2,*}

¹Hebei Key Laboratory of Energy Storage Technology and Integrated Energy Utilization, North China Electric Power University, Baoding 071003, Hebei, China.

²Department of Power Engineering, North China Electric Power University, Baoding 071003, Hebei, China.

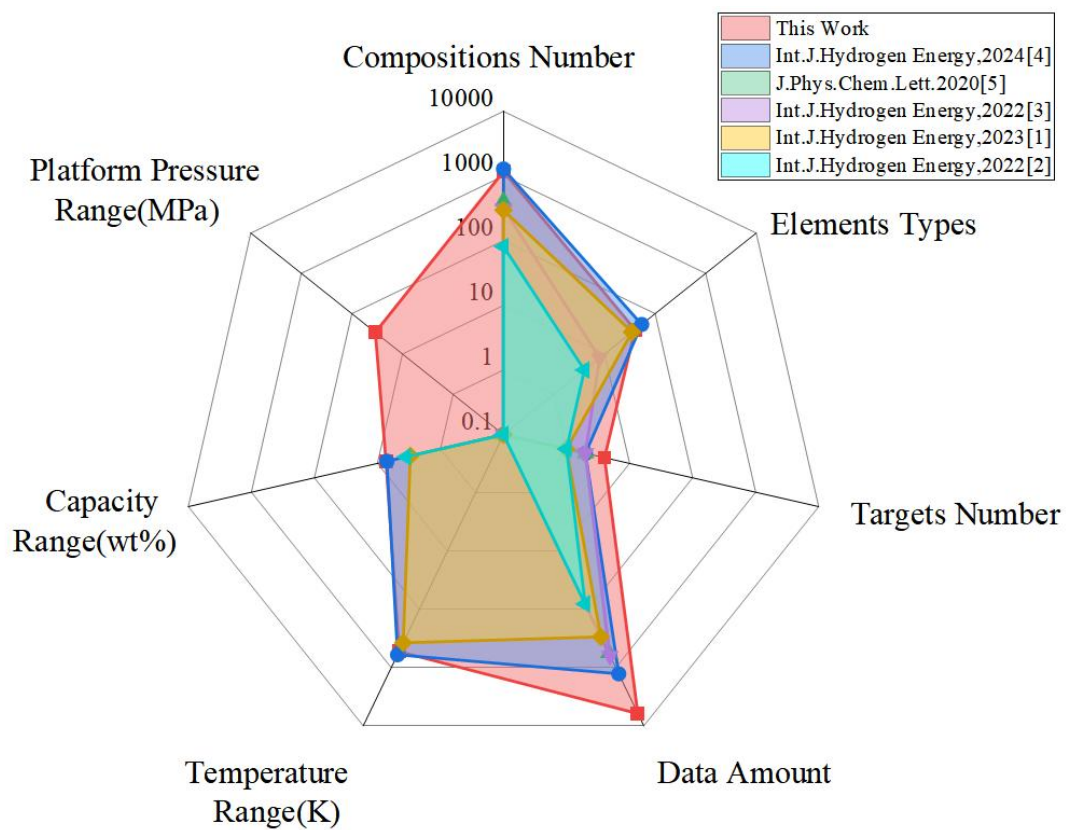
³Department of Computer Science, North China Electric Power University, Baoding 071003, Hebei, China.

⁴Department of Mathematics and Physics, North China Electric Power University, Baoding 071003, Hebei, China.

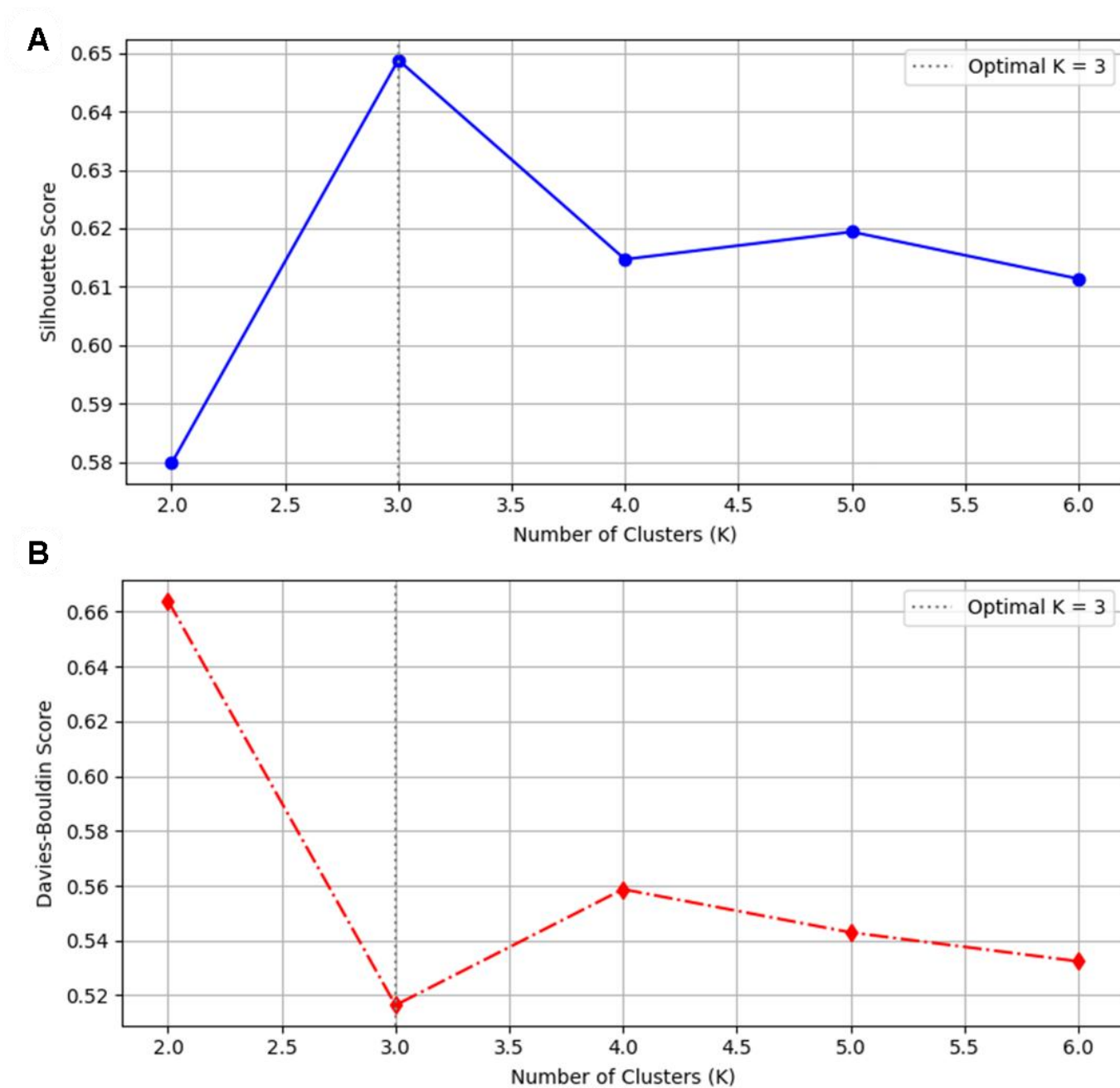
***Correspondence to:** Prof. Weijie Yang, Hebei Key Laboratory of Energy Storage Technology and Integrated Energy Utilization, North China Electric Power University, No. 619 Yonghua North Street, Baoding 071003, Hebei, China. E-mail: yangwj@ncepu.edu.cn

Table of Contents

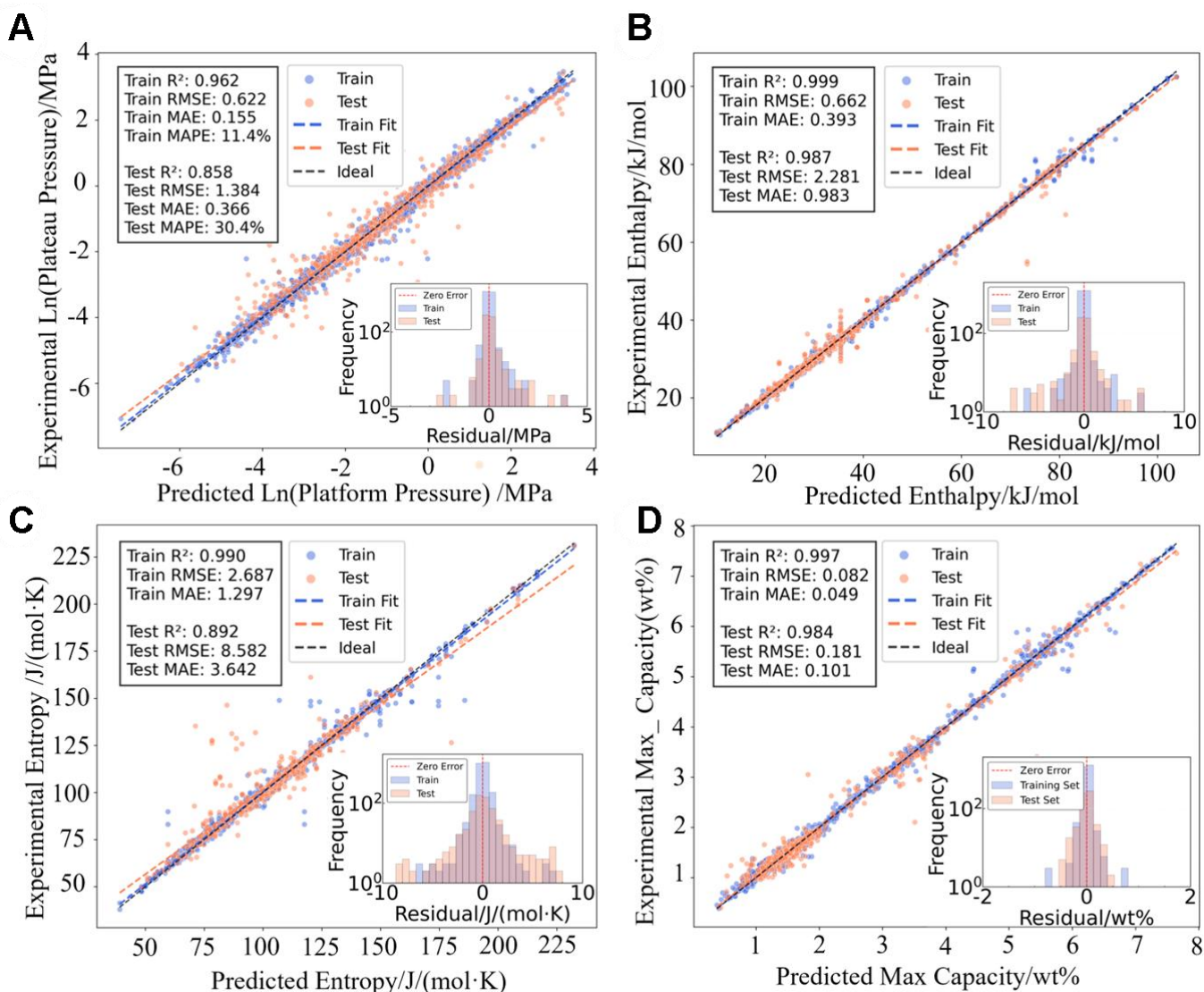
Supplementary Figure 1. Comparison of multi-dimensional indicators of databases ^[1-5]	1
Supplementary Figure 2. Silhouette Score and Davies–Bouldin Index as Functions of Cluster Number (k)	2
Supplementary Figure 3. Scatter plots and residual histograms of the XGBoost model for hydrogen desorption.	3
Supplementary Figure 4. Genetic algorithm optimization of alloys in the Mg–Ni–La system.	4
Supplementary Table 1. The DOIs of all references included in the FIND database.	5
Supplementary Table 2. Unsupervised Clustering Alloy Example.	17
Supplementary Table 3. Comparison of predicted hydrogen desorption properties between this study and literature models.	18
Supplementary Table 4. Four ML models' training hyperparameters (absorption and desorption).	19
Supplementary Table 5. Residual mean and standard deviation for training and testing sets on hydrogen absorption/ desorption Side (CatBoost).	20
Supplementary Table 6. Twelve potential optimal Mg–Ni–La alloy–temperature combinations identified by the GA.	21
Reference	22



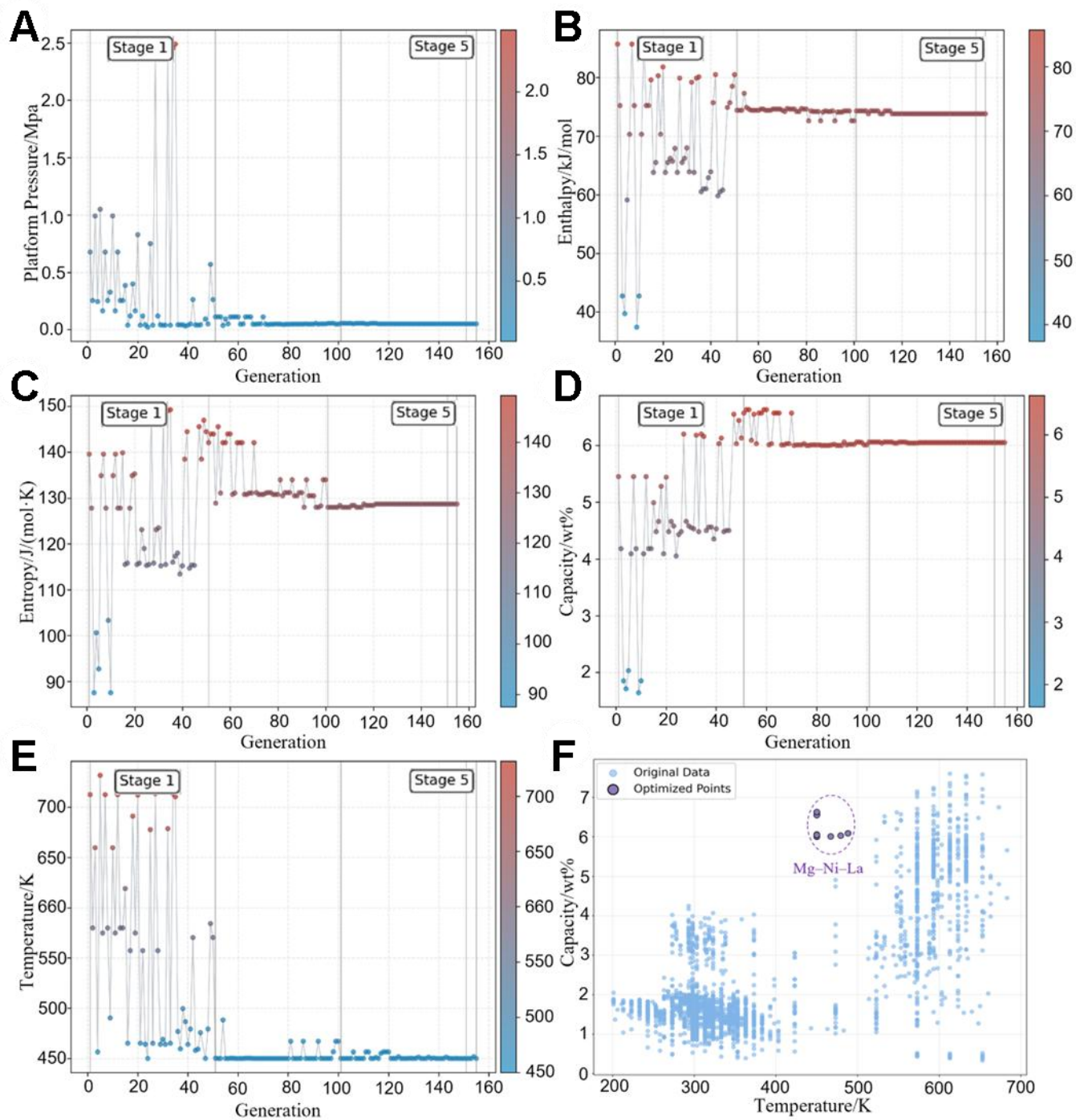
Supplementary Figure 1. Comparison of multi-dimensional indicators of databases^[1-5].



Supplementary Figure 2. Silhouette Score and Davies–Bouldin Index as Functions of Cluster Number (k).
(A) Silhouette Score; (B) Davies–Bouldin Index.



Supplementary Figure 3. Scatter plots and residual histograms of the XGBoost model for hydrogen desorption. (A) ln(Plateau pressure)/MPa; (B) Enthalpy/kJ/mol; (C) Entropy/J/(mol·K); (D) Max Capacity/wt%.



Supplementary Figure 4. Genetic algorithm optimization of alloys in the Mg–Ni–La system. (A) Evolution of plateau pressure over generations; (B) Evolution of enthalpy over generations; (C) Evolution of entropy over generations; (D) Evolution of hydrogen storage capacity over generations; (E) Evolution of temperature over generations; (F) Distribution of the potential optimal alloys in the original database.

Supplementary Table 1. The DOIs of all references included in the FIND database

No.	DOI
1	10.1016/j.ijhydene.2012.12.100
2	10.1016/j.ijhydene.2009.08.064
3	10.1016/j.ijhydene.2024.04.214
4	10.1002/sml.202309609
5	10.1007/s11837-021-04952-z
6	10.1007/s42243-019-00337-4
7	10.1016/j.ijhydene.2010.01.017
8	10.1016/j.ijhydene.2007.01.012
9	10.1016/j.jallcom.2024.174315
10	10.1016/j.ijhydene.2013.07.073
11	10.1016/j.ijhydene.2008.11.102
12	10.1016/j.jallcom.2022.165355
13	10.1016/j.pnsc.2017.08.012
14	10.1016/j.jallcom.2022.168466
15	10.1016/j.jallcom.2022.167024
16	10.1016/j.powtec.2018.08.085
17	10.1016/j.jallcom.2021.159925
18	10.1016/j.ijhydene.2020.02.086
19	10.1016/j.ijhydene.2021.05.017
20	10.1016/j.ijhydene.2021.02.179
21	10.1016/j.jallcom.2021.160905
22	10.1016/j.ijhydene.2016.07.091
23	10.1016/j.ijhydene.2017.01.194
24	10.1016/j.ijhydene.2017.04.247
25	10.1016/j.ijhydene.2014.12.089
26	10.1016/j.ijhydene.2017.11.163
27	10.1016/j.jallcom.2022.164605
28	10.1016/j.jallcom.2021.160035
29	10.1016/j.jallcom.2021.161181
30	10.1016/j.ijhydene.2022.01.058
31	10.1016/j.ijhydene.2021.06.019
32	10.1016/j.jallcom.2015.12.125
33	10.1016/j.ijhydene.2019.02.172

No.	DOI
34	10.1016/j.ijhydene.2018.02.103
35	10.1016/j.jallcom.2017.02.166
36	10.1016/j.energy.2018.10.121
37	10.1016/j.jallcom.2018.03.154
38	10.1007/s40195-022-01403-9
39	10.1016/j.jallcom.2020.156075
40	10.1016/j.ijhydene.2022.09.227
41	10.1016/j.ijhydene.2018.12.144
42	10.1016/j.ijhydene.2018.08.046
43	10.1016/j.renene.2018.09.072
44	10.1016/j.jallcom.2021.161785
45	10.1016/S1003-6326(21)65717-5
46	10.1021/acsami.7b13541
47	10.1016/j.ijhydene.2023.03.307
48	10.1016/j.ijhydene.2019.11.242
49	10.1016/j.pnsc.2018.07.006
50	10.1016/j.jallcom.2015.02.138
51	10.1016/j.ijhydene.2017.01.080
52	10.1016/j.jallcom.2017.10.075
53	10.1016/j.jallcom.2023.169935
54	10.1016/j.ijhydene.2021.03.247
55	10.1016/j.renene.2020.02.035
56	10.1016/j.ijhydene.2021.08.143
57	10.1016/j.jallcom.2022.165273
58	10.1016/j.jallcom.2021.160883
59	10.1016/j.ijhydene.2017.04.089
60	10.1016/j.ijhydene.2015.09.157
61	10.1016/j.cej.2023.142837
62	10.1016/j.ijhydene.2019.03.241
63	10.1016/j.pnsc.2017.09.007
64	10.1016/j.matchemphys.2023.127407
65	10.1016/j.ijhydene.2023.11.045
66	10.1016/j.jallcom.2021.162145
67	10.1016/j.renene.2019.05.052

No.	DOI
68	10.1016/j.ijhydene.2022.03.018
69	10.1016/j.jallcom.2015.03.196
70	10.1016/j.jallcom.2022.167947
71	10.1016/j.jallcom.2013.09.141
72	10.1016/j.jallcom.2014.12.045
73	10.1016/j.cej.2024.153489
74	10.1016/j.jallcom.2023.169893
75	10.1016/j.jallcom.2019.03.134
76	10.1016/j.ijhydene.2022.10.098
77	10.1016/j.jallcom.2023.173163
78	10.1016/j.ijhydene.2019.05.005
79	10.1016/j.ijhydene.2023.07.049
80	10.1039/d3ra01131c
81	10.1016/j.matchemphys.2023.128362
82	10.1016/j.ijhydene.2022.09.027
83	10.1557/s43578-022-00555-9
84	10.1016/S1003-6326(18)64893-9
85	10.1016/j.jallcom.2023.170551
86	10.1016/j.jallcom.2021.161629
87	10.1016/j.jallcom.2022.166992
88	10.1016/j.jallcom.2015.04.074
89	10.1016/S1003-6326(19)65014-4
90	10.1016/j.jallcom.2014.10.097
91	10.1016/j.ijhydene.2021.06.137
92	10.1039/d3ta02197a
93	10.1016/j.ijhydene.2024.09.014
94	10.1016/j.renene.2024.121117
95	10.1016/j.pnsc.2024.02.008
96	10.1016/j.ijhydene.2021.02.184
97	10.1016/j.ijhydene.2019.04.281
98	10.1016/j.ijhydene.2015.12.099
99	10.1016/j.ijhydene.2019.01.216
100	10.1016/j.ijhydene.2019.01.148
101	10.1016/j.ijhydene.2018.11.173

No.	DOI
102	10.1016/j.ijhydene.2015.11.068
103	10.1016/j.matchar.2021.111583
104	10.1016/j.ijhydene.2017.11.112
105	10.1016/j.ijhydene.2021.12.110
106	10.1016/j.ijhydene.2024.08.198
107	10.1016/j.ijhydene.2024.09.141
108	10.1016/j.jallcom.2023.171219
109	10.1016/j.jallcom.2024.177324
110	10.1016/S1002-0721(12)60358-5
111	10.1016/j.ijhydene.2024.10.128
112	10.1016/j.ijhydene.2017.05.179
113	10.1016/j.energy.2022.124888
114	10.1016/j.jpowsour.2019.05.093
115	10.1016/j.jmst.2019.03.037
116	10.1016/j.renene.2020.05.043
117	10.1016/j.ijhydene.2022.06.013
118	10.1016/j.ijhydene.2022.01.212
119	10.1016/j.jallcom.2021.163118
120	10.1016/j.scriptamat.2019.12.009
121	10.1016/j.pnsc.2024.07.011
122	10.1016/j.ijhydene.2018.11.104
123	10.20964/2019.01.38
124	10.1016/j.ijhydene.2018.07.090
125	10.1016/j.ijhydene.2017.07.213
126	10.1016/j.intermet.2015.03.002
127	10.1016/j.ijhydene.2023.03.100
128	10.1016/j.ijhydene.2014.05.011
129	10.1016/j.jre.2023.08.019
130	10.1007/s12274-023-6389-0
131	10.1016/j.jallcom.2014.07.206
132	10.1016/j.ijhydene.2018.07.183
133	10.1016/j.ijhydene.2017.03.051
134	10.1016/j.matchemphys.2024.129219
135	10.1016/j.ijhydene.2023.09.121

No.	DOI
136	10.1016/j.jallcom.2023.170665
137	10.1016/j.ijhydene.2012.01.131
138	10.1016/j.ijhydene.2024.07.066
139	10.1016/j.ijhydene.2016.06.206
140	10.1016/j.ijhydene.2009.08.023
141	10.1016/j.ijhydene.2021.10.106
142	10.1021/acsaem.4c01167
143	10.19799/j.cnki.2095-4239.2022.0247
144	10.1007/s10008-014-2515-y
145	10.1007/s11665-024-10367-z
146	10.1007/s40195-017-0696-y
147	10.4028/www.scientific.net/AMR.512-515.1503
148	10.1016/j.jallcom.2005.04.007
149	10.1088/1742-6596/1359/1/012103
150	10.1039/c8ta00822a
151	10.1016/j.jpowsour.2024.235573
152	10.1179/1743284714Y.00000000636
153	10.1016/j.ijhydene.2021.04.021
154	10.1016/j.ijhydene.2016.03.112
155	10.1016/j.ijhydene.2017.09.157
156	10.1016/j.jallcom.2014.12.098
157	10.1016/j.ijhydene.2012.11.107
158	10.1021/jp500439n
159	10.1016/j.ijhydene.2022.06.108
160	10.1016/j.ijhydene.2024.03.231
161	10.1021/acs.jpcc.6b08291
162	10.1016/j.pnsc.2017.03.010
163	10.1016/j.jre.2019.05.012
164	10.1016/j.ijhydene.2020.11.195
165	10.1016/j.ijhydene.2016.09.049
166	10.1016/j.jre.2023.11.005
167	10.1016/j.jpccs.2022.110744
168	10.1016/j.electacta.2015.10.055
169	10.1016/j.jmst.2020.02.042

No.	DOI
170	10.1016/j.jallcom.2008.12.018
171	10.1016/j.est.2021.103702
172	10.1016/j.jallcom.2022.166064
173	10.1016/j.ijhydene.2009.12.010
174	10.1016/j.ijhydene.2013.03.007
175	10.1016/j.jallcom.2014.12.267
176	10.1016/j.ijhydene.2012.11.094
177	10.1016/j.calphad.2012.12.002
178	10.1016/S0925-8388(01)01409-8
179	10.3390/en13112751
180	10.1016/j.jallcom.2019.07.170
181	10.1039/C6RA01585A
182	10.1016/j.jallcom.2020.154354
183	10.1016/S0925-8388(03)00222-6
184	10.1016/j.ijhydene.2012.03.096
185	10.1016/j.ijhydene.2016.10.113
186	10.1016/j.ijhydene.2021.06.127
187	10.1007/s40195-019-00879-2
188	10.1016/S1003-6326(13)62733-8
189	10.1016/j.ijhydene.2006.09.044
190	10.1016/S0925-8388(03)00642-X
191	10.1016/j.jallcom.2010.11.205
192	10.1016/j.jallcom.2017.10.268
193	10.1016/j.ijhydene.2009.10.041
194	10.1016/j.jma.2021.11.026
195	10.1016/j.ijhydene.2017.04.198
196	10.1016/j.ijhydene.2024.08.371
197	10.1016/j.ijhydene.2022.05.071
198	10.1016/j.matchemphys.2019.121725
199	10.1016/j.jallcom.2018.11.164
200	10.1016/j.ijhydene.2016.07.107
201	10.1016/S1452-3981(23)04993-3
202	10.1016/j.jallcom.2020.157443
203	10.1016/j.renene.2022.07.113

No.	DOI
204	10.1016/j.ijhydene.2014.12.093
205	10.1016/j.ijhydene.2016.04.083
206	10.1016/j.ijhydene.2020.05.215
207	10.1016/j.ijhydene.2020.12.071
208	10.1016/j.pnsc.2022.03.001
209	10.2320/matertrans.M2011334
210	10.1016/j.jpowsour.2015.09.058
211	10.1016/j.electacta.2015.05.049
212	10.1016/j.jallcom.2017.08.170
213	10.1016/j.ijhydene.2018.03.130
214	10.1016/j.ijhydene.2016.05.220
215	10.1016/j.scriptamat.2006.08.052
216	10.1016/j.energy.2019.116617
217	10.1016/j.jpowsour.2018.08.080
218	10.1016/j.jpowsour.2019.227273
219	10.1016/j.ijhydene.2007.05.026
220	10.1016/j.ijhydene.2022.05.057
221	10.1016/j.jallcom.2018.04.121
222	10.1016/j.jssc.2005.04.036
223	10.1016/j.ijhydene2023.03.329
224	10.1016/j.ijhydene.2023.07.194
225	10.1016/j.ijhydene.2011.02.089
226	10.1016/j.ijhydene.2014.03.039
227	10.1016/j.ijhydene.2014.02.135
228	10.1016/j.jma.2020.09.027
229	10.1016/j.jallcom.2016.08.307
230	10.1021/acs.jpcc.5b08984
231	10.1016/j.jpcc.2023.111320
232	10.1016/j.psep.2023.08.063
233	10.1016/j.matchar.2020.110795
234	10.1016/j.jallcom.2014.10.200
235	10.1016/j.jallcom.2012.01.018
236	10.1016/j.intermet.2014.10.004
237	10.1016/j.jallcom.2023.169497

No.	DOI
238	10.1016/j.jmrt.2023.02.085
239	10.1016/j.ijhydene.2020.05.130
240	10.1016/j.ijhydene.2020.12.101
241	10.1016/j.jallcom.2003.07.009
242	10.1016/j.jallcom.2019.04.236
243	10.1016/S1002-0721(12)60071-4
244	10.1016/j.renene.2019.01.106
245	10.1016/j.ijhydene.2018.02.199
246	10.2139/ssrn.4951125
247	10.1016/j.jallcom.2021.160315
248	10.1016/j.ijhydene.2023.10.327
249	10.1016/j.nanoen.2023.108483
250	10.1016/j.jallcom.2013.03.163
251	10.1016/S1002-0721(12)60239-7
252	10.1016/j.mseb.2012.08.003
253	10.1016/j.jallcom.2014.12.082
254	10.1016/j.ijhydene.2024.02.192
255	10.1016/j.jallcom.2024.175868
256	10.1016/j.jallcom.2018.09.009
257	10.1088/2053-1591/acf0a1
258	10.1016/j.jallcom.2009.06.005
259	10.1016/j.jpowsour.2020.228236
260	10.1016/j.scriptamat.2008.12.001
261	10.1016/j.ijhydene.2010.05.009
262	10.1016/j.ijhydene.2009.12.018
263	10.1016/j.est.2024.110608
264	10.1016/j.ijhydene.2024.05.112
265	10.1016/j.jallcom.2024.174229
266	10.1016/j.jre.2024.02.003
267	10.1016/j.jma.2020.12.009
268	10.1016/j.ijhydene.2014.11.024
269	10.1016/j.ijhydene.2023.05.011
270	10.1016/j.pnsc.2022.02.001
271	10.1021/acsaem.4c01850

No.	DOI
272	10.1007/s12598-024-02627-7
273	10.1016/S1002-0721(12)60086-6
274	10.1016/j.jallcom.2004.07.049
275	10.1016/j.ijhydene.2010.07.083
276	10.1016/j.est.2024.111926
277	10.3390/met12071122
278	10.1016/j.jallcom.2021.159111
279	10.1007/s41365-016-0029-2
280	10.1016/j.heliyon.2023.e17430
281	10.1016/j.ijhydene.2018.02.086
282	10.1002/er.4675
283	10.1016/j.ijhydene.2024.05.317
284	10.1039/c8ra05429k
285	10.1016/j.matchemphys.2024.129491
286	10.1021/acs.energyfuels.2c00011
287	10.1016/j.ijhydene.2024.04.327
288	10.3390/ma14020276
289	10.1021/acs.jpcc.5b00279
290	10.1021/jp103910e
291	10.1016/j.est.2023.109553
292	10.1007/s11172-016-1538-1
293	10.1007/s12598-010-0175-3
294	10.1007/s42243-018-0177-1
295	10.1007/s11595-018-1848-1
296	10.1016/j.ijhydene.2024.06.055
297	10.1016/S1875-5372(16)30150-3
298	10.15344/2455-2372/2016/124
299	10.1557/JMR.2009.0338
300	10.1016/S1875-5372(10)60132-4
301	10.3390/met14090967
302	10.1016/j.ijhydene.2024.05.120
303	10.1016/j.jallcom.2011.11.010
304	10.3390/en17010071
305	10.1016/S1452-3981(23)14307-0

No.	DOI
306	10.1007/s40242-019-9173-7
307	10.1134/S1023193516050141
308	10.1016/S1875-5372(16)30046-7
309	10.1016/j.cej.2024.157864
310	10.1016/j.mtcomm.2024.109380
311	10.1016/j.ijhydene.2021.02.183
312	10.3390/en13061437
313	10.1016/j.jpccs.2024.112284
314	10.1016/j.jallcom.2013.02.178
315	10.1016/j.ijhydene.2008.11.051
316	10.1016/j.jallcom.2012.02.085
317	10.1007/s12598-011-0413-3
318	10.1016/j.ijhydene.2022.12.253
319	10.1149/1.1845337
320	10.1016/j.ijhydene.2022.02.017
321	10.1016/j.ijhydene.2014.07.016
322	10.1016/j.matchar.2022.112406
323	10.1016/j.ijhydene.2012.07.073
324	10.1021/acsomega.2c03367
325	10.1016/j.jallcom.2023.170951
326	10.1007/s42243-019-00340-9
327	10.1016/j.jmst.2022.10.057
328	10.1021/acsaem.3c01934
329	10.1016/j.ijhydene.2023.11.334
330	10.1016/j.ijhydene.2021.08.041
331	10.1016/j.cej.2024.153243
332	10.1016/j.jalmes.2023.100006
333	10.1016/j.ijhydene.2019.04.111
334	10.1016/j.jallcom.2019.02.259
335	10.1016/j.ijhydene.2023.04.260
336	10.1039/c5ta02554k
337	10.1039/D2DT01957D
338	10.1016/j.jpowsour.2014.06.093
339	10.1016/j.jallcom.2023.169098

No.	DOI
340	10.1016/j.jallcom.2015.11.215
341	10.1016/j.ijhydene.2020.10.195
342	10.1016/j.jallcom.2017.04.217
343	10.1016/j.jpowsour.2011.07.038
344	10.1016/j.vacuum.2021.110865
345	10.1016/j.mseb.2006.04.020
346	10.1016/j.jallcom.2023.173069
347	10.1016/j.ijhydene.2024.08.400
348	10.1007/s40195-024-01709-w
349	10.1021/acssuschemeng.3c07291
350	10.1039/c5ta00292c
351	10.1007/s10853-023-09265-x
352	10.1016/j.ijhydene.2024.02.330
353	10.1016/j.jmst.2024.03.071
354	10.1016/j.jpowsour.2023.232695
355	10.1016/j.jmrt.2023.05.208
356	10.1016/j.cej.2023.145654
357	10.1007/s00339-021-05132-1
358	10.1016/j.jallcom.2021.161791
359	10.1007/s12598-022-01962-x
360	10.1039/d0ra10224e
361	10.1088/1742-6596/1683/3/032036
362	10.1115/1.4055694
363	10.2320/matertrans.MT-M2019224
364	10.1134/S1070427220090104
365	10.1016/j.jallcom.2019.05.076
366	10.1039/C6TA02889F
367	10.1007/s12598-014-0302-7
368	10.2139/ssrn.4963680
369	10.3390/cryst7100316
370	10.1021/acs.jpcc.4c04818
371	10.1016/j.ijhydene.2024.10.432
372	10.1021/acs.energyfuels.4c01025
373	10.1021/acsaem.1c03901

No.	DOI
374	10.1016/j.jallcom.2018.04.235
375	10.1016/j.jallcom.2018.01.076
376	10.1007/s12598-024-02618-8
377	10.1142/S0217979214501252
378	10.1039/C9DT03944A
379	10.1016/j.jallcom.2009.01.126
380	10.1016/S1452-3981(23)17134-3
381	10.1016/j.jpowsour.2013.01.199
382	10.3390/met10050578
383	10.1007/s11665-018-3644-8
384	10.1016/j.ijhydene.2023.01.180
385	10.3390/ma17061366

Supplementary Table 2. Unsupervised Clustering Alloy Example

Cluster	Some chemical components
0	$V_{65}Ti_{15}Cr_2$ 、 $V_{70}Ti_{10}Cr_{20}$ 、 Ti_2CrV 、 $V_{75}Ti_5Cr_{20}$ 、 $Ti_{36}V_{26}Cr_9Mn_{29}$ 、 $V_{70}Ti_{10}Cr_{20}$ 、 $Ti_{36}V_{26}Cr_9Mn_{29}$ 、 $Ti_{32}Cr_{43}V_{25}$ 、 $Ti_{28}Cr_{26}V_{40}Fe_6$ 、 $Ti_{32}Cr_{40}V_{25}Fe_3$ 、 $TiCr_3V_{16}$ 、 $Ti_{30}Cr_{24}V_{40}Fe_6$ 、 $TiCr_3V_{16}Ce_{0.1}$ 、 $V_{65}Ti_{15}Cr_{20}$ 、 $V_{82}Ti_{41}Cr_{73}Al_{0.08}$ 、 $Ti_{29}Cr_{25}V_{40}Fe_6$ 、 $Ti_{30}Cr_{24}V_{40}Fe_6$ 、 $TiV_{1.1}Cr_{0.3}Mn_{0.6}$ 、 $Ti_{27}Cr_{27}V_{40}Fe_6$ 、 $Ti_{32}Cr_{38}V_{25}Fe_5$ 、 $TiCr_3V_{16}Ce_{0.2}$ 、 $TiCr_3V_{16}Ce_{0.4}$
1	$Nd_5Mg_{85}Al_{10}$ 、 $Mg_{95}Al_5$ 、 $Mg_{94}Al_5Y$ 、 $Mg_{90}Al_{10}$ 、 $Mg_{93}Al_5Y_2$ 、 $Mg_{82}Nd_8Al_{10}$ 、 $Mg_{92}Al_5Y_3$ 、 $Nd_2Mg_{88}Al_{10}$ 、 $Mg_{92.6}Al_{5.1}Zr_{2.3}$ 、 $Mg_{85}Ni_{10}La_5$ 、 $Mg_{95}Y_3Zn_2$ 、 $Mg_{98}Ni_{1.67}La_{0.33}$ 、 $Pr_5Mg_{90}Ni_5$ 、 $Mg_{85}Ni_{10}La_4Y$ 、 $Mg_{90}Al_5Y_5$ 、 $Mg_{90}Ce_5Y_5$ 、 $Mg_{90}Ce_5Sm_5$
2	$TiCr_{1.1}Mn_{0.3}Fe_{0.6}$ 、 $Ti_{1.02}Cr_{1.1}Mn_{0.3}Fe_{0.6}$ 、 $Ti_{1.04}Cr_{1.1}Mn_{0.3}Fe_{0.6}$ 、 $Ti_{45.4}Fe_{45.4}Zr_{2.55}Mn_{6.55}$ 、 $Ti_{44.5}Fe_{44.5}Zr_{2.5}Mn_{6.5}Nb_2$ 、 $Ti_{0.85}Zr_{0.17}Cr_{1.2}Fe_{0.8}$ 、 $Ti_{0.95}Zr_{0.05}Mn_{1.1}Cr_{0.7}V_{0.2}$ 、 $Ti_{0.94}Zr_{0.06}Mn_{1.1}Cr_{0.7}V_{0.2}$ 、 $TiCr_{1.25}Mn_{0.75}$ 、 $Ti_{0.93}Zr_{0.07}Mn_{1.1}Cr_{0.7}V_{0.2}$ 、 $Ti_{0.95}Zr_{0.05}Mn_{1.3}Cr_{0.5}V_{0.2}$ 、 $TiCr_{1.5}Mn_{0.5}$ 、 $Ti_{0.95}Zr_{0.05}Mn_{0.9}Cr_{0.9}V_{0.2}$ 、 $Ti_{1.02}Cr_{1.1}Mn_{0.3}Fe_{0.6}La_{0.03}$ 、 $Ti_{1.02}Cr_{1.1}Mn_{0.3}Fe_{0.6}Ce_{0.03}$ 、 $Ti_{1.02}Cr_{1.1}Mn_{0.3}Fe_{0.6}Ho_{0.03}$

Supplementary Table 3. Comparison of predicted hydrogen desorption properties between this study and literature models

Target	ML Model	MAE	RMSE	MAPE	R ²
$\ln(P_{eq})$	SVM ^[6]	0.216	0.293	-	0.974
$\ln(P_{eq})$	<i>XGBoost</i>	<i>0.366</i>	<i>1.384</i>	<i>30.40%</i>	<i>0.887</i>
$\ln(P_{eq})$	<i>RF</i>	<i>0.495</i>	<i>1.610</i>	<i>46.69%</i>	<i>0.808</i>
$\ln(P_{eq})$	<i>GradientBoosting</i>	<i>0.342</i>	<i>1.277</i>	<i>29.57%</i>	<i>0.879</i>
$\ln(P_{eq})$	<i>CatBoost</i>	<i>0.310</i>	<i>1.192</i>	<i>25.80%</i>	<i>0.895</i>
ΔH	GBDT ^[6]	1.428	1.907	-	0.825
ΔH	<i>XGBoost</i>	<i>0.983</i>	<i>2.281</i>	<i>2.70%</i>	<i>0.987</i>
ΔH	<i>RF</i>	<i>1.396</i>	<i>2.616</i>	<i>3.88%</i>	<i>0.983</i>
ΔH	<i>GradientBoosting</i>	<i>0.728</i>	<i>2.128</i>	<i>1.99%</i>	<i>0.989</i>
ΔH	<i>CatBoost</i>	<i>0.832</i>	<i>2.628</i>	<i>2.15%</i>	<i>0.983</i>
ΔS	<i>XGBoost</i>	<i>3.642</i>	<i>8.582</i>	<i>3.71%</i>	<i>0.892</i>
ΔS	<i>RF</i>	<i>5.033</i>	<i>9.595</i>	<i>5.12%</i>	<i>0.864</i>
ΔS	<i>GradientBoosting</i>	<i>2.993</i>	<i>8.313</i>	<i>3.06%</i>	<i>0.898</i>
ΔS	<i>CatBoost</i>	<i>3.104</i>	<i>8.626</i>	<i>3.19%</i>	<i>0.890</i>
H ₂ wt%	GBDT ^[6]	0.075	0.100	-	0.644
<i>H₂wt%</i>	<i>XGBoost</i>	<i>0.101</i>	<i>0.181</i>	<i>5.60%</i>	<i>0.984</i>
<i>H₂wt%</i>	<i>RF</i>	<i>0.111</i>	<i>0.195</i>	<i>6.48%</i>	<i>0.981</i>
<i>H₂wt%</i>	<i>GradientBoosting</i>	<i>0.097</i>	<i>0.188</i>	<i>5.20%</i>	<i>0.982</i>
<i>H₂wt%</i>	<i>CatBoost</i>	<i>0.092</i>	<i>0.178</i>	<i>5.11%</i>	<i>0.984</i>

Note: The forward model developed in this study is indicated in italics.

Supplementary Table 4. Four ML models' training hyperparameters (absorption and desorption)

Model	Absorption	Desorption
XGBoost	model__estimator__subsample: 0.6	model__estimator__subsample: 0.6
	model__estimator__reg_lambda: 1	model__estimator__reg_lambda: 1
	model__estimator__reg_alpha: 0	model__estimator__reg_alpha: 0
	model__estimator__n_estimators: 1000	model__estimator__n_estimators: 1000
	model__estimator__max_depth: 5	model__estimator__max_depth: 5
	model__estimator__learning_rate: 0.05	model__estimator__learning_rate: 0.05
	model__estimator__gamma: 0	model__estimator__gamma: 0
	model__estimator__colsample_bytree: 0.8	model__estimator__colsample_bytree: 0.8
RandomForest	model__estimator__n_estimators: 100	model__estimator__n_estimators: 400
	model__estimator__min_samples_split: 5	model__estimator__min_samples_split: 2
	model__estimator__min_samples_leaf: 2	model__estimator__min_samples_leaf: 2
	model__estimator__max_features: 0.8	model__estimator__max_features: 0.8
	model__estimator__max_depth: None	model__estimator__max_depth: 20
	model__estimator__subsample: 0.8	model__estimator__subsample: 1.0
	model__estimator__n_estimators: 1000	model__estimator__n_estimators: 1000
	model__estimator__min_samples_split: 5	model__estimator__min_samples_split: 5
GradientBoosting	model__estimator__min_samples_leaf: 2	model__estimator__min_samples_leaf: 4
	model__estimator__max_features: 0.6	model__estimator__max_features: 0.8
	model__estimator__max_depth: 4	model__estimator__max_depth: 5
	model__estimator__learning_rate: 0.1	model__estimator__learning_rate: 0.1
	model__estimator__min_data_in_leaf: 15	model__estimator__min_data_in_leaf: 10
	model__estimator__learning_rate: 0.05	model__estimator__learning_rate: 0.07
	model__estimator__l2_leaf_reg: 1	model__estimator__l2_leaf_reg: 5
	model__estimator__iterations: 1500	model__estimator__iterations: 1500
CatBoost	model__estimator__grow_policy:	model__estimator__grow_policy:
	Depthwise	Depthwise
	model__estimator__depth: 6	model__estimator__depth: 8
	model__estimator__bootstrap_type:	model__estimator__bootstrap_type:
	Bayesian	Bernoulli

Supplementary Table 5. Residual mean and standard deviation for training and testing sets on hydrogen absorption/ desorption Side (CatBoost)

	Ab				De			
	Train		Test		Train		Test	
	μ	σ	μ	σ	μ	σ	μ	σ
Plateau pressure/MPa	0.03	0.30	0.14	0.66	0.02	0.37	0.18	1.18
Enthalpy /kJ/mol	-0.00	0.61	0.01	1.74	0.00	0.49	0.19	2.62
Entropy/J/(mol·K)	0.00	2.33	0.41	7.12	-0.00	2.23	-0.57	8.61
Max Capacity/wt%	-0.00	0.08	-0.01	0.18	-0.00	0.07	0.01	0.18

Supplementary Table 6. Twelve potential optimal Mg–Ni–La alloy–temperature combinations identified by the GA

Number	Components	Temperature /K	Plateau Pressure/MPa	Enthalpy/kJ/mol	Entropy / J/(mol·K)	Max Capacity/wt %
1	Mg _{0.856} Ni _{0.095} La _{0.050}	488.3	0.036	77.3	128.9	6.09
2	Mg _{0.938} Ni _{0.061} La _{0.001}	479.3	0.049	75.7	138.5	6.03
3	Mg _{0.930} Ni _{0.069} La _{0.001}	467.1	0.048	72.6	134	6.01
4	Mg _{0.977} Ni _{0.022} La _{0.001}	450.2	0.111	74.4	142.1	6.57
5	Mg _{0.971} Ni _{0.028} La _{0.001}	450	0.093	74.9	145.6	6.55
6	Mg _{0.956} Ni _{0.025} La _{0.020}	450	0.050	74.6	131.1	6.03
7	Mg _{0.976} Ni _{0.023} La _{0.001}	450	0.111	74.4	144	6.63
8	Mg _{0.954} Ni _{0.027} La _{0.020}	450	0.047	74.6	130.8	6.01
9	Mg _{0.953} Ni _{0.025} La _{0.022}	450	0.048	74.2	131.2	6
10	Mg _{0.952} Ni _{0.028} La _{0.020}	450	0.044	74.7	130.8	6.01
11	Mg _{0.956} Ni _{0.023} La _{0.021}	450	0.055	74.3	128	6.06
12	Mg _{0.955} Ni _{0.023} La _{0.022}	450	0.051	73.8	128.7	6.05

REFERENCES

1. Dong, S., et al., *Exploration and design of Mg alloys for hydrogen storage with supervised machine learning*. International Journal of Hydrogen Energy, 2023. **48**(97): p. 38412-38424. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.06.108>
2. Lu, Z., et al., *Predicting hydrogen storage capacity of V–Ti–Cr–Fe alloy via ensemble machine learning*. International Journal of Hydrogen Energy, 2022. **47**(81): p. 34583-34593. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.08.050>
3. Suwarno, S., et al., *Machine learning analysis of alloying element effects on hydrogen storage properties of AB₂ metal hydrides*. International Journal of Hydrogen Energy, 2022. **47**(23): p. 11938-11947. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.210>
4. Wilson, N., et al., *HyStor: An experimental database of hydrogen storage properties for various metal alloy classes*. International Journal of Hydrogen Energy, 2024. **90**: p. 460-469. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.09.390>
5. Witman, M., et al., *Extracting an empirical intermetallic hydride design principle from limited data via interpretable machine learning*. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2019. **11**(1): p. 40-47. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpclett.9b02971>
6. Zhou, P., et al., *Machine learning enabled customization of performance-oriented hydrogen storage materials for fuel cell systems*. Energy Storage Materials, 2023. **63**: p. 102964. <https://doi.org/10.1016/j.ensm.2023.102964>