Supporting Information for

Electrode Informatics Accelerated Optimization for Catalyst

Layer Key Parameters in Direct Methanol Fuel Cells

Lishou Ban^{a†}, Danyang Huang^{a†}, Yanyi Liu^{a†}, Pengcheng Liu^a, Xihui Bian^b, Kaili Wang^c, Yifan Liu^{*d}, Xijun Liu^{e*}, and Jia He^{a*}

 School of Chemistry and Chemical Engineering, Institute for New Energy Materials & Low-Carbon Technologies, School of Materials Science and Engineering, Tianjin University of Technology, Tianjin 300384, China

b. State Key Laboratory of Separation Membranes and Membrane Processes, School of Chemical Engineering and Technology, Tiangong University, Tianjin 300387, China

c. School of Chemistry, Chemical Engineering and Environmental Engineering, Weifang University, Weifang 261061, China

d. Suzhou Laboratory, Suzhou 215100, China.

e. State Key Laboratory of Featured Metal Materials and Life-cycle Safety for Composite Structures, Guangxi Key Laboratory of Processing for Non-ferrous Metals and Featured Materials, School of Resources, Environment and Materials, Guangxi University, Nanning, 530004 Guangxi, China

[†] These authors contributed equally to this work.

* E-mail: sparkle06@163.com; xjliu@gxu.edu.cn; hejia1225@126.com

Table S1. Boundary conditions.

	Boundary conditions										
Boundary areas	Charge transport	Momentum transmission	Mass transport								
Fuel inlet	-	- U_in_anode									
Fuel outlet	-	1 atm	Convection								
Air inlet	-	U_in_cathode	xO ₂ c_in, xH ₂ Oc_in								
Air outlet	-	1 atm	Convection								
Anode GDL outer surface	Insulation	-	No slippage								
Cathode GDL outer surface	Insulation	-	No slippage								
Fuel and air flow channel walls	Insulation	No slippage	No slippage								
Anode electrode outer surface	Electrical grounding	-	-								
Cathode electrode outer surface	E_cell	-	-								

Table S2. DMFC Model Parameters.

Parameter	Value
Runner length	0.01 m
Runner height	0.001 m
Runner width	1.5748E-4 m
Runner spacing	1.81864E-4 m
GDL height	3.8E-4 m
Porous electrode height	5E-5 m
Proton exchange membrane height	1E-4 m
Porosity of GDL	0.7
Permeability of GDL	1E-12 m ²
Electronic conductivity of GDL	222 S/m
Integral of the ionomer in CL	0.25
Porosity of CL	0.3
Permeability of CL	2E-14 m ²
Proton Conductivity of CL (nafion)	12.3 S/m
Electronic conductivity of CL (solid)	222 S/m
Conductivity of the membrane	9.825 S/m
Cathode oxygen mass fraction	0.228
Cathode water mass fraction	0.01
Molar mass of water	0.018 kg/mol
Molar mass of oxygen	0.032 kg/mol
Molar mass of nitrogen	0.028 kg/mol
Molar mass of cathode oxygen	0.20418
Molar mass of cathode water	0.015921
Molar mass of cathode nitrogen	0.77989
Anode inlet velocity	0.13 m/s
Cathode inlet velocity	0.4 m/s
Anode viscosity coefficient	1.19E-5 Pa·s
Cathode viscosity coefficient	2.46E-5 Pa·s
MeOH-H ₂ O Binary diffusion coefficient	$1E-5 m^2/s$
O ₂ -N ₂ Binary diffusion coefficient	2.8238E-5 m ² /s
O ₂ -H ₂ O Binary diffusion coefficient	3.3188E-5 m ² /s
N ₂ -H ₂ O Binary diffusion coefficient	3.0291E-5 m ² /s
Cell temperature	338.15 K
Reference pressure	1.01E5 Pa
Cell voltage	1 V
Oxygen reference concentration	36.5 mol/m ³
Methanol reference concentration	100 mol/m ³
Molar gas constant	8.314 J/(mol·K)
Specific surface area	1E5 1/m
Anode equilibrium potential	0.046 V
Cathode equilibrium potential	1.05 V
Anode reference current density	43.82 A/m ²
Cathode reference current density	0.0422 A/m ²
Inlet methanol concentration	1000 mol/m ³
Diffusion coefficient of methanol in the membrane	1.1989E-12 m ² /s

Table S3. DMFC Database

NO. T 0	45 0.00005	0,00005	poro_CL-apo: 0.3	0, 3	afion_CLn 0,25	afion_CLe. 0.25	0, 45	1ec_CL_cU 0,45	_in_an U 0.13	_in_ca_kappa_CL_kappa_CI 0,4 2,00E-14 2,00E-1	4 1	Av_an /	loo000	sigma_CL_ 1 222	sigma_CL 12.3	_MeOH_ref (100	2 PD 36, 50, 0572866
1	55 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0613302
2	65 0.00005 75 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630602 36.50.0623355
4	85 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0605014
5	95 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0572562
7	65 0. 0000005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0027878
8	65 0.000001	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0042519
9	65 0.000005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0238954
11	65 0.000025	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0520388
12	65 0.000035	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0581919
13	65 0.000045	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36, 50, 0639764
15	65 0.000065	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0651629
16	65 0.000075	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0658332
18	65 0.00005	0.000001	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0198438
19	65 0.00005	0.000005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0355632
20	65 0.00005	0.000015	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.5 0.049434
22	65 0.00005	0.000035	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0553668
23	65 0.00005	0.000045	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0619156
24	65 0.00005	0.000055	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0640544 36. 5 0. 0656525
26	65 0.00005	0.000075	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0668902
27	65 0. 00000050	0.0000005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0014624
28	65 0.000005	0.000001	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.5 0.013108
30	65 0.000015	0.000015	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.5 0.032233
31	65 0.000025	0.000025	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0452451
33	65 0.000045	0.000035	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 060741
34	65 0.000055	0.000055	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0649781
35	65 0.000065	0.000065	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0678578
37	65 0.00005	0.000075	0.3	0.3	0.1	0.25	0.6	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0508117
38	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.2	0.25	0.5	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.5 0.060737
39	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.3	0.25	0.4	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36, 50, 0646844
41	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.5	0.25	0.2	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0678861
42	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.6	0.25	0.1	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0685344
44	65 0.00005	0.00005	0.1	0.3	0.45	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0658976
45	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630673
46	65 0.00005	0.00005	0.4	0.3	0.15	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0569609
48	65 0.00005	0.00005	0. 1	0.3	0.25	0.25	0. 65	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	3 100	36. 5 0. 0630717
49	65 0.00005	0.00005	0.2	0.3	0.25	0.25	0.55	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0631291
50	65 0.00005	0.00005	0.3	0, 3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	3 100	36.50.0630673
52	65 0.00005	0.00005	0.5	0.3	0.25	0.25	0.25	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0631303
53	65 0.00005	0.00005	0.6	0.3	0.25	0.25	0.15	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	8 100	36.5 0.063068
54	65 0.00005	0.00005	0.7	0.3	0.25	0.25	0.05	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630753
56	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.2	0.45	0.5	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0610334
57	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.3	0.45	0.4	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0645066
59	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.4	0.45	0.3	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0674329
60	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.6	0.45	0.1	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0680356
61	65 0.00005	0.00005	0.3	0.1	0.25	0.45	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0660859
63	65 0.00005	0.00005	0.3	0.2	0.25	0.35	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0632044
64	65 0.00005	0.00005	0.3	0.4	0.25	0.15	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0578357
65	65 0.00005	0.00005	0.3	0.5	0.25	0.05	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0434543
67	65 0.00005	0.00005	0.3	0.2	0.25	0.25	0.45	0.55	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	3 100	36.50.0628825
68	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630602
69	65 0.00005	0.00005	0.3	0.4	0.25	0.25	0.45	0.35	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0631473
71	65 0.00005	0.00005	0.3	0.6	0.25	0.25	0.45	0.15	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0632471
72	65 0.00005	0.00005	0.3	0.7	0.25	0.25	0.45	0.05	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0632838
74	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.1	0.1	0.5	0.6	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0435025
75	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.3	0.3	0.4	0.4	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0661982
76	65 0.00005 65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.4	0.4	0.3	0.3	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0703001 36.50.0728021
78	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.6	0.6	0.1	0.1	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12. 3	100	36.50.0744446
79	65 0.00005	0.00005	0.1	0.1	0.45	0.45	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0707645
81	65 0.00005	0.00005	0.2	0.2	0.35	0.35	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0630602
82	65 0.00005	0.00005	0.4	0.4	0.15	0.15	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.5 0.052615
83	65 0.00005	0.00005	0.5	0.5	0.05	0.05	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0300538
85	65 0.00005	0.00005	0.2	0.2	0.25	0.25	0.55	0.55	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0632038
86	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630602
87	65 0.00005	0.00005	0.4	0.4	0.25	0.25	0.35	0.35	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36, 50, 0631476
89	65 0.00005	0.00005	0.6	0.6	0.25	0.25	0.15	0.15	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0632478
90	65 0.00005	0.00005	0.7	0.7	0.25	0.25	0.05	0.05	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0632846
91	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.01	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 062987
93	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.1	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630583
94	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.15	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630611
96	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.45	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0630651
97	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.6	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0630658
98	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.75	0.4 2.00E-14 2.00E-1 0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36, 50, 0630663
100	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	2	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0630679
101	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.1 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0595456
102	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.3 2.00E-14 2.00E-1 0.5 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0626148
104	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.75 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0637451
105	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	1 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.5 0.063971
100	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	2 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 064393
108	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	3.5 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0646597
109	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	5 2.00E-14 2.00E-1 8 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0649792
111	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 0.1	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0228318
112	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 0.3	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0276552
113	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 1	100000	100000	1 222	12.3	100	36. 5 0. 0630602
115	65 0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4 2.00E-14 2.00E-1	4 3	100000	100000	1 222	12.3	100	36.50.0773888

Table S3. DMFC Database(continued)

116	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 5	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0824429
117	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-1-	2.00E-1	4 7	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0852363
118	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 9	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0871454
119	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 11	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0885706
120	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 15	100000	100000	1	222	12.3	100	36.5 0.090609
121	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0,45	0,45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	10000	10000	1	222	12.3	100	36.5 0.012356
122	65	0.00005	0,00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0,45	0,45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	30000	30000	1	222	12.3	100	36, 50, 0293814
123	65	0.00005	0.00005	0.3	0,3	0.25	0.25	0,45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	50000	50000	1	222	12.3	100	36, 50, 0418339
124	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36, 50, 0630602
125	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	300000	300000	1	222	12.3	100	36.50.1028567
126	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2 00E-1	2 00E-1	4 1	500000	500000	1	222	12.3	100	36 50 1232052
127	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0 45	0.45	0.13	0.4	2 00E-14	2 00E-1	4 1	1000000	1000000	1	222	12.3	100	36 50 1534342
128	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0 45	0.45	0.13	0.4	2 00E-14	2 00E-1	4 1	3000000	3000000	1	222	12.3	100	36 50 2099211
120	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2 00E-1	1 2 00E-1	4 1	5000000	5000000	1	222	12.3	100	36 50 2383779
130	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2 00E-1	2 00E-1	4 1	10000000	10000000	1	222	12 3	100	36 5 0 27720
131	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2 00E-14	2.00E-1	4 1	10000	1000000	1	222	12.3	100	36 5 0 022882
132	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2 00E-1	2.00E-1	4 1	30000	100000	1	222	12.3	100	36 5 0 039972
132	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.005-1	2.00E-1	4 1	50000	100000	1	222	12.3	100	26 5 0.039912
124	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.005-1	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	10.0	100	36.5 0.049929
195	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.000-1	2.00E-1	4 1	200000	100000	1	222	10.0	100	36.5 0.00300
126	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.002-1	2.00E-1	4 1	500000	100000	1	222	12.3	100	26 5 0.09220
130	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.000-1	2.00E-1	4 1	1000000	100000	1	000	10.9	100	30.3 0.03235
130	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2 005-1	2.00E 1	4 1	3000000	100000	1	000	10.0	100	36.5 0.00101
130	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	5000000	100000	1	222	12.3	100	30.3 0.09418
130	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.005 1	2.00E 1	4 1	10000000	100000	1	222	10.2	100	26 5 0.00020
140	05	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.005 1	2.00E 1		1000000	100000	1	222	10.0	100	26 5 0.03020
141	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-1-	2.00E-1	- 1	100000	20000	1	222	12.3	100	36.5 0.0324
142	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.005-14	2.00E-1	4 1	100000	50000	1	222	10.0	100	36.5 0.0439
143	05	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.000-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	10.0	100	36.5 0.0326
144	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.002-1-	2.00E-1	4 1	100000	200000	1	222	12.3	100	36.5 0.0031
140	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.000-1	2.00E-1	4 1	100000	500000	1	222	10.0	100	36.5 0.0817
140	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.005-14	2.00E-1	4 1	100000	1000000	1	222	10.0	100	36.5 0.0908
140	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.000-1-	2.00E-1	4 1	100000	2000000	1	222	12.3	100	36.5 0.103
140	00	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.20	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-1-	2.00E-1	2 1	100000	5000000	1	000	10.0	100	30. 5 0. 13
149	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00E-14	2.00E-1	9 1	100000	1000000	1	222	12.3	100	30.5 0.142
150	60	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.005-14	2.00E-1	9 1	100000	10000000	0 1	222	12.3	100	30.5 0.101
151	05	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00E-14	4 2.00E-1	9 1	100000	100000	0.1	222	12.3	100	36. 50. 0119488
152	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	0.5	222	12.3	100	36.50.0487893
153	00	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.008-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	0.75	222	12.3	100	36.50.0567763
154	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0631254
155	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1.25	222	12.3	100	36.50.0680484
156	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1.5	222	12.3	100	36.50.0720884
157	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	2	222	12.3	100	36.50.0785048
158	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	3.5	222	12.3	100	36.50.0910975
159	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	5	222	12.3	100	36.50.0992117
160	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	8	222	12.3	100	36.50.1113685
161	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	10	12.3	100	36.50.0605073
162	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	50	12.3	100	36.50.0625627
163	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	100	12.3	100	36.50.0628455
164	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	130	12.3	100	36.50.0629941
165	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	160	12.3	100	36.50.0629803
166	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	190	12.3	100	36.50.0630231
167	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	220	12.3	100	36.50.0630652
168	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	250	12.3	100	36.50.0630231
169	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	310	12.3	100	36.50.0631378
170	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	1000	12.3	100	36.5 0.063442
171	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	1	100	36.50.0289634
172	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	3	100	36.50.0429632
173	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	5	100	36.5 0.05056
174	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	7	100	36.50.0555094
175	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	9	100	36.50.0590321
176	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	11	100	36.50.0616713
177	65	0,00005	0,00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0,45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	13	100	36, 50, 0637963
178	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	15	100	36.5 0.0652
179	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	17	100	36.5 0.0667
180	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	19	100	36.5 0.0678
181	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	10	36.50.0878054
182	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	30	36.5 0.078601
183	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	50	36.50.0728018
184	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	90	36.50.0647907
185	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	130	36.50.0583745
186	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	170	36.50.0531734
187	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	210	36.50.0489532
188	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	270	36.50.0439839
189	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-1+	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	400	36.5 0.036666
190	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	500	36.50.0328635
191	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	5 0.0987
192	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-1-	4 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	10 0.0852
193	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-1	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	15 0.0781
194	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	200.0731368
195	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	250.0693581
196	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	300.0663064
197	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	350.0637516
198	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	400.0615577
199	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	450.0596379
200	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	50 0.057933
201	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	1.00E-15	5 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
202	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	5.00E-18	5 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
203	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	1.00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
204	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	5.00E-14	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
205	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	1.00E-13	3 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
206	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	5.00E-13	3 2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
207	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	1.00E-12	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
208	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	5.00E-12	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
209	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	1.00E-11	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
210	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	5.00E-11	2.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
211	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1.00E-1	5 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630623
212	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	5.00E-1	5 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630604
213	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	1.00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630602
214	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	5. 00E-1	4 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.50.0630601
215	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0, 25	0. 25	0, 45	0, 45	0, 13	0.4	2. 00E-14	1. 00E-1	3 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36.5 0.06306
216	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00E-14	5.00E-1	3 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36, 50, 0630599
217	65	0.00005	0. 00005	0.3	0.3	0. 25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00F-1	1.00F-1	2 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36. 50. 0630599
218	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2.00E-14	5.00E-1	2 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36, 50, 0630599
219	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0. 25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2. 00E-14	1. 00E-1	1 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36, 50, 0630599
220	65	0.00005	0.00005	0.3	0.3	0.25	0.25	0.45	0.45	0.13	0.4	2 00E-1	5 00E-1	1 1	100000	100000	1	222	12.3	100	36 5 0 06306
	0.0	21 000000	21 00000	0.0	010	01 80	01 80	0.10	0. 10	01 10	0.4				100030	100000		No the sid		100	2210 0100300



Figure S1. DMFC Grid Consistency Verification.



Figure S2. Concentration distribution of reactants and products (0.25 V): (a) Molar concentration of methanol at the anode, (b) Molar concentration of CO2 at the anode, (c) Molar concentration of oxygen at the cathode, (d) Molar concentration of water at the cathode. Cross current density generated by methanol infiltration at the anode (0.25 V). Liquid Saturation at Cathode GDL and CL (0.25 V).



Figure S3. Polarization curve obtained by changing the ratio between porosity and nafion in the catalyst layer; (a) Porosity changes, nafion remains unchanged; (b) Porosity changes, nafion changes; (c) Porosity remains unchanged and nafion changes.



Figure S4. Polarization curve obtained by changing the inlet velocity of methanol at the anode and oxygen at the cathode.



Figure S5. Polarization curve obtained by changing temperature and pressure.



Figure S6. Polarization curves obtained by changing (a) electron conductivity and (b) proton conductivity.



Figure S7. Polarization curve obtained by changing (a) anode methanol concentration and (b) cathode oxygen concentration.



Figure S8. Polarization curve obtained by changing anode methanol inlet concentration.



Figure S9. The influence of different parameters on the maximum power density amplitude of fuel cells from simulation model (top 6).



Figure S10. The other four algorithms' data training test (90% - 10%) error plots. (a)KRR; (b)LASSO; (c)RIDGE; (d)SVR. Training data (blue), test data (red).



Figure S11. Average feature importance prediction plots using the ratio of maximum power density to different pressures based on the best ETR models in ten-fold cross-validation (top 6).