

**Table S6. Summary of four A-series dipole-interaction polarizable models in anisotropic polarizability calculations.**

A-Series Models		Set1	Set2	Set3	Set4	Set5	Set6	Set7	Set8	Set9	Set10	Set11	Set12	Set13	All
#Data		595	665	107	38	444	28	85	606	105	1252	799	57	61	4842
<b>Applequist (No 1-2, 1-3 Interactions)</b>															
<b>Diagonal Elements</b>	AUE	8.17	0.66	12.49	19.81	11.07	34.19	5.28	7.02	9.73	14.02	0.59	12.72	19.60	8.04
	RMSE	9.15	0.75	14.13	22.82	12.60	35.65	6.01	7.91	11.45	16.09	0.69	14.72	22.53	9.16
	APE	10.64	2.81	18.88	18.39	8.16	17.33	7.32	5.07	4.35	14.38	2.67	25.89	26.72	8.76
<b>All elements</b>	AUE	4.53	0.42	7.35	11.47	8.76	20.39	3.50	6.04	7.85	8.03	0.39	6.87	10.60	5.13
	RMSE	6.65	0.58	10.29	16.51	11.23	26.87	4.65	7.19	10.05	11.75	0.53	10.51	16.09	7.09
<b>Molecular Polarizability</b>	AUE	4.23	0.39	7.60	16.55	5.63	22.48	2.75	3.57	5.45	9.50	0.35	6.70	13.63	4.89
	APE	4.89	1.20	10.81	15.96	4.06	10.17	3.68	2.48	2.41	9.13	1.15	11.95	17.46	4.90
<b>MPAD</b>	APE	11.12	3.28	19.54	22.13	9.16	16.23	7.89	5.59	5.01	16.30	3.15	25.60	29.78	9.72
<b>Thole Exponential (No 1-2, 1-3 Interactions)</b>															
<b>Diagonal</b>	AUE	8.60	0.54	12.11	21.13	11.44	36.64	5.26	7.16	9.34	14.56	0.47	12.93	19.84	8.26
	RMSE	9.67	0.60	13.87	24.17	12.93	37.99	5.86	8.05	10.77	16.72	0.53	15.06	22.81	9.39
	APE	11.19	2.39	17.96	19.78	8.39	18.65	7.23	5.17	4.12	14.97	2.25	26.09	26.90	8.88
<b>All Elements</b>	AUE	4.73	0.35	7.12	12.05	9.04	21.60	3.51	6.06	7.57	8.27	0.32	6.96	10.71	5.23
	RMSE	7.00	0.47	10.10	17.41	11.56	28.47	4.62	7.21	9.55	12.16	0.42	10.74	16.28	7.24
<b>Molecular Polarizability</b>	AUE	4.44	0.39	7.10	17.75	5.70	23.89	2.35	3.32	4.36	9.81	0.35	6.58	13.77	4.95
	APE	5.09	1.66	9.71	17.32	4.06	10.84	3.23	2.28	1.91	9.40	1.60	11.59	17.47	5.07
<b>MPAD</b>	APE	11.69	2.78	18.68	23.67	9.35	17.31	7.67	5.67	4.69	16.86	2.63	25.87	29.97	9.81
<b>Thole Linear (No 1-2, 1-3 Interactions)</b>															
<b>Diagonal Elements</b>	AUE	8.22	0.44	12.02	20.83	11.18	35.59	5.20	7.01	9.77	14.12	0.37	12.76	19.67	8.02
	RMSE	9.20	0.49	13.70	23.88	12.71	37.01	5.78	7.90	11.54	16.22	0.41	14.80	22.60	9.13
	APE	10.72	2.10	17.89	19.50	8.21	17.90	7.16	5.07	4.37	14.49	1.92	25.81	26.74	8.57
<b>All Elements</b>	AUE	4.55	0.30	7.04	11.86	8.82	21.06	3.45	6.04	7.88	8.06	0.27	6.88	10.63	5.11
	RMSE	6.69	0.41	9.96	17.20	11.32	27.80	4.54	7.19	10.10	11.82	0.36	10.57	16.14	7.07
<b>Molecular Polarizability</b>	AUE	4.24	0.26	7.17	17.52	5.71	23.68	2.41	3.54	5.57	9.59	0.22	6.68	13.69	4.89
	APE	4.91	1.05	9.85	17.13	4.09	10.72	3.30	2.47	2.46	9.23	0.97	11.82	17.48	4.86
<b>MPAD</b>	APE	11.18	2.39	18.55	23.42	9.21	16.84	7.60	5.58	5.04	16.41	2.20	25.59	29.81	9.47
<b>Thole Amoeba (No 1-2, 1-3 Interactions)</b>															
<b>Diagonal Elements</b>	AUE	8.25	0.40	12.31	20.43	11.23	35.04	5.25	7.02	9.72	14.15	0.37	12.84	19.67	8.04
	RMSE	9.24	0.45	13.99	23.44	12.76	36.41	5.92	7.90	11.43	16.25	0.41	14.91	22.61	9.14
	APE	10.74	2.24	18.43	19.12	8.25	17.78	7.27	5.07	4.34	14.53	2.11	26.07	26.81	8.65
<b>All Elements</b>	AUE	4.57	0.29	7.22	11.70	8.87	20.80	3.49	6.04	7.85	8.07	0.27	6.92	10.63	5.12
	RMSE	6.71	0.38	10.18	16.91	11.37	27.40	4.61	7.19	10.03	11.84	0.36	10.64	16.14	7.08
<b>Molecular Polarizability</b>	AUE	4.28	0.15	7.37	17.14	5.70	22.92	2.57	3.51	5.39	9.59	0.13	6.72	13.69	4.85
	APE	4.94	0.57	10.25	16.73	4.08	10.38	3.48	2.44	2.38	9.21	0.52	11.96	17.51	4.72
<b>MPAD</b>	APE	11.22	2.48	19.05	22.96	9.24	16.59	7.78	5.58	4.99	16.42	2.34	25.82	29.86	9.53