**ambient and high pressure polymorphs of ice from Diffusion Monte Carlo and Density Functional Theory**

We note here that, in principle, several structures should be considered when computing the lattice energy of hydrogendisordered polymorphs. Based on a DFT analysis reported in the SI, we estimate that the differences among the lattice energies of different hydrogen arrangements are of the order of the DMC error bars. Being indistinguishable at the DMC level, we consider only one hydrogen arrangement for each hydrogen-disordered phase.

* PAW method
* Hard pseudopotential/soft(?) pseudopotential
* Role of k grid in convergence

La differenza nell’errore nella stima sul valore assoluto di lattice e su quello relativo è dovuto a al fatto che nel primo caso, l’errore dipende da quanto distante un funzionale da un risultato rispetto a quello calcolato tramite la DMC. Nel secondo caso dipende dal fatto che nel calcolo dell’energia di reticolo per la fase voluta e quella di riferimento (Ih) l’errore assoluto si mantenga costante, quindi anche se l’energia è sovrastimata, la differenza tra le energie è quella che conta. Se questa differenza combacia con quella nel DMC allora l’errore relativo sarà piccolo.

**Quantum chemical accuracy from density functional approximations via machine learning**

Kohn-Sham density functional theory (DFT) is a standard tool in most branches of chemistry, but accuracies for many molecules are limited to 2-3 kcal ⋅ mol−1 with presently-available functionals. Ab initio methods, such as coupled-cluster, routinely produce much higher accuracy