

Efficient generation of Clifford circuits

周书予

2000013060@stu.pku.edu.cn

2021 年 12 月 11 日

1 引言

Clifford 线路是由 Hadamard 门 H 、相位门 S 以及 controlled-NOT 门 CNOT 组成的量子线路，这三个门被称为 Clifford 门，而由 Clifford 线路实现的算符被称作 Clifford 算符¹。可以验证所有 Clifford 算符构成一个乘法群，我们把这个群称作 Clifford group，记作 C_n ，下标 n 表示作用在 n 个量子比特上。

这次作业的主要工作是研究 Clifford group 的内部结构。section 2 将会证明任意作用在 n 个量子比特上的 Clifford 算符都可以被 $O(n^2)$ 个 Clifford 门组合实现，这意味着任意 Clifford 算符都具有实现高效性；在 section 3 中我们引入了 Canonical form 这一记号，并证明它与 Clifford 算符之间存在一一对应；这是卓有意义的，因为双射的存在将允许我们对 Clifford 线路进行随机采样——我们只需要随机采样 Canonical form 就可以了！这部分工作会在 section 4 中被介绍。

2 第一部分

在展开证明前我们先引入一些记号。记 \mathcal{P}_n 表示 n 个量子比特上的 Pauli group，也就是 $\{I, X, Y, Z\}^{\otimes n}$ ，乘上 $\pm 1, \pm i$ 作为 global phase。乘上 global phase 的目的是让群对乘法封闭。可以验证 Pauli group \mathcal{P}_n 是 C_n 的一个子群。

定义 \mathcal{P}_n 的正规化子 (normalizer) $\mathcal{N}(\mathcal{P}_n)$ 为所有满足 $\forall g \in \mathcal{P}_n, UgU^\dagger \in \mathcal{P}_n$ 的么正算符 U 构成的集合。通过验证 $\mathcal{N}(\mathcal{P}_n)$ 对乘法以及求逆封闭，我们可以知道 $\mathcal{N}(\mathcal{P}_n)$ 构成 n 阶么正群的一个子群。

为了完成证明，我们需要证明如下两个引理：

引理 1 任意 Clifford 算符都是 $\mathcal{N}(\mathcal{P}_n)$ 中的元素。

引理 2 任意 $\mathcal{N}(\mathcal{P}_n)$ 中的算符 U 都可以被 $O(n^2)$ 个 Clifford 门实现，至多差一个 global phase。

根据以上两个引理可以立即得到，任意 Clifford 算符都可以被 $O(n^2)$ 个 Clifford 门实现，至多差一个 global phase。实际上“至多差一个 global phase”的修辞是可以去掉的，因为可以验证 Clifford group 里中包含的 global phase 有且仅有 $\{e^{\pi i k/4} : k \in [0, 7]\}$ 这 8 种（其中 $(SH)^3 = e^{\pi i/4}I$ 可以作为生成元），因此 Clifford group 中任意 global phase 均可以通过 $O(1)$ 个 Clifford 门实现。

值得一提的是，部分文章 [1] 对 Clifford 算符的定义方式就是 $\mathcal{N}(\mathcal{P}_n)/U(1)$ ，即 \mathcal{P}_n 的正规化子忽略掉 global phase。两种定义在 global phase 的处理上是有所不同的，这会引起一些描述上的偏差，比如说下文中将在忽略 global phase 的基础上叙述 $|C_n| = 2^{n^2+2n} \prod_{i=1}^n (4^i - 1)$ ，而如果考虑 global phase 的话，其结果还需要乘 8。

2.1 引理 1 的证明

由于任何 Clifford 算符都可以写成 Hadamard 门、相位门以及 CNOT 门乘积的形式，我们只需要证明这三个 Clifford 门属于 $\mathcal{N}(\mathcal{P}_n)$ 就行了，具体地我们要对于 $U \in \{H, S, \text{CNOT}\}$ ，证明 $\forall g \in \mathcal{P}_n, UgU^\dagger \in \mathcal{P}_n$ 。

这项工作其实非常简单，只需要列举所有情况（见表 1）验证就可以了。表格里只展示了 UXU^\dagger 和 UZU^\dagger 的结果，因为 $UYU^\dagger = i(UXU^\dagger)(UZU^\dagger)$ 可以被前两者唯一确定。

2.2 引理 2 的证明

这部分的证明就比较麻烦了。总体的思路是对量子比特数 n 作归纳（这是一种极其不直观的方法），分为三步：

- 第一步：证明任意 $U \in \mathcal{N}(\mathcal{P}_1)$ 都可以由 $O(1)$ 个 Hadamard 门与相位门实现；
- 第二步：假设任意 $U' \in \mathcal{N}(\mathcal{P}_n)$ 都可以由 $O(n^2)$ 个 Clifford 门实现，对于任何满足 $UZ_1U^\dagger = X_1 \otimes g$ 以及 $UX_1U^\dagger = Z_1 \otimes g'$ 的 $U \in \mathcal{N}(\mathcal{P}_{n+1})$ ，证明它都可以由 $O(n^2)$ 个 Clifford 门实现；

¹还存在一种别的对于 Clifford 算符的定义方式，将在稍后提及。

- 第三步：把第二步的结果推广，证明不做任何限制的 $U \in \mathcal{N}(\mathcal{P}_{n+1})$ 都可以由 $O(n^2)$ 个 Clifford 门实现。

上面的三条叙述都还需要加上“至多差一个 global phase”。

由于这部分的证明有点冗长，并且与接下来将要讨论的内容关系不大，因此就全部搬到附录里了，详见 section B。

3 第二部分

以下内容都是这篇文章 [2] 中介绍的。在引入所谓 Canonical form 之前，我们先研究一下 Clifford group \mathcal{C}_n 的子群结构。为了行文方便，在接下来的所有叙述中，我们均忽略 global phase²。下表中列出了 \mathcal{C}_n 的一些子群以及对应的生成元集合：

记号	名称	生成元集合
\mathcal{C}_n	Clifford group	H, S, CNOT
\mathcal{F}_n	Hadamard-free group	$X, S, \text{CNOT}, \text{CZ}$
\mathcal{B}_n	Borel group	$X, S, \text{CNOT}^\dagger, \text{CZ}$
\mathcal{S}_n	Symmetric group	SWAP
\mathcal{P}_n	Pauli group	X, Z

其中 CNOT 和 CZ 分别表示 Controlled- X 门与 Controlled- Z 门。

注意到 \mathcal{C}_n 的生成元集合其实也可以写成 $\{X, Z, H, S, \text{CNOT}, \text{CZ}\}$ ，这是因为 $Z = S^2, X = HZH, \text{CZ} = H_2 \cdot \text{CNOT} \cdot H_2$ 。这样写就能明显地看出表中的所有群都是 \mathcal{C}_n 的子群。

考虑这样一件事情：Hadamard 门是（在 computational basis 下）唯一会产生叠加态的 Clifford 门，这说明 Hadamard-free group \mathcal{F}_n 中的任何算符都不能产生任何叠加，即只能把基矢映成基矢，因而可以被表示成如下的形式：

$$F|x\rangle = i^{x^T \Gamma x} O|\Delta x\rangle \quad (1)$$

其中 $x \in \mathbb{F}_2^n, \Gamma, \Delta \in \mathbb{F}_2^{n \times n}, O \in \mathcal{P}_n$ ，所有矩阵乘法均在 \mathbb{F}_2 下进行。 Δ 必须是可逆的，它表示了 n 个量子比特之间可能存在的纠缠，而 Γ 的唯一作用则是确定相位³，它必须是对称的，这是因为 $i^{x^T \Gamma x} = \prod_{i=1}^n i^{x_i \Gamma_{ii}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} i^{x_i x_j (\Gamma_{ij} + \Gamma_{ji})}$ ，一旦 $\Gamma_{ij} \neq \Gamma_{ji}$ 就将导致 controlled- S 门在 \mathcal{F}_n 中的出现，产生矛盾。

\mathcal{B}_n 生成元集合中的 CNOT^\dagger 记号表示控制比特比目标比特标号小的 CNOT 门，这使得 eq. (1) 式中的 Δ 变成了下三角，且对角元全是 1。这样的简化也使得我们可以直接地写出算符 F 的量子线路表示⁴：

$$F = O \prod_{i=1}^n S_i^{\Gamma_{ii}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \text{CZ}_{i,j}^{\Gamma_{i,j}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \text{CNOT}_{i,j}^{\Delta_{j,i}} \quad (2)$$

接下来，我们会用 $F(O, \Gamma, \Delta)$ 来表示 eq. (2) 中的 F 。

定义 1 我们称算符 $F(O, \Gamma, \Delta)$ 的 Pauli 部分是平凡的，如果 $O = I$ 。

顺带一提的是 $|\mathcal{B}_n| = 2^{n^2+2n}$ ，这是因为 O, Γ, Δ 分别有 $4^n, 2^{\frac{n^2+n}{2}}, 2^{\frac{n^2-n}{2}}$ 种取法，注意忽略了 global phase。

我们引入本文最为核心的一个定理：

定理 1 (Canonical Form) 任意 $U \in \mathcal{C}_n$ 都可以被唯一地写成

$$U = F(I, \Gamma, \Delta) \cdot \left(\prod_{i=1}^n H_i^{h_i} \right) \sigma \cdot F(O', \Gamma', \Delta') \quad (3)$$

其中 $h \in \{0, 1\}^n, \sigma \in \mathcal{S}_n$ 是 n 阶排列， $F(I, \Gamma, \Delta), F(O', \Gamma', \Delta') \in \mathcal{B}_n$ ，其中 Γ, Δ 需要满足条件：对于 $\forall 1 \leq i, j \leq n$ ：

- C1** 若 $h_i = 0, h_j = 0$ ，则 $\Gamma_{i,j} = 0$ ；
- C2** 若 $h_i = 1, h_j = 0, \sigma(i) > \sigma(j)$ ，则 $\Gamma_{i,j} = 0$ ；
- C3** 若 $h_i = 0, h_j = 0, \sigma(i) > \sigma(j)$ ，则 $\Delta_{i,j} = 0$ ；
- C4** 若 $h_i = 1, h_j = 1, \sigma(i) < \sigma(j)$ ，则 $\Delta_{i,j} = 0$ ；
- C5** 若 $h_i = 1, h_j = 0$ ，则 $\Delta_{i,j} = 0$ ；

²严谨地讲，是始终只考虑 \mathcal{C}_n 及其子群在商掉 $U(1)$ 后得到的商群。

³这个相位是关于 x 的函数，因此并不是 global phase。

⁴需要注意的是这里的 Γ 并不严格对应 eq. (1) 式中的 Γ ，因为 eq. (1) 中相位被表示成了关于 x 的双线性函数，而在这里，对应给 Γ 的输入等地变成了 Δx 。当然我们可以换一个记号（令 $\Gamma' = \Delta \Gamma \Delta^T$ 仍是对称的）来实现这样的转化，原论文并没有显式地指出这一点。

这个定理初看是十分迷惑的，因为这些不知所云的古怪限制通过我们难以理解的方式，确立了 Canonical form 的表示唯一性。通过 Bruhat decomposition theorem [3] 以及下面两条引理，我们将得到对于 Canonical form 更深入的理解。

定理 2 (Bruhat decomposition) Clifford group C_n 可以写成如下不交并的形式

$$C_n = \bigsqcup_{h \in \{0,1\}^n} \bigsqcup_{\sigma \in S_n} B_n \left(\prod_{i=1}^n H_i^{h_i} \right) \sigma B_n \quad (4)$$

定义 2 对于 $h \in \{0,1\}^n, \sigma \in S_n$ ，定义 B_n 的子群

$$B_n(h, \sigma) = \{F \in B_n : W^{-1}FW \in B_n\} \quad (5)$$

(可以很容易地验证这是一个子群) 其中 $W = \left(\prod_{i=1}^n H_i^{h_i} \right) \sigma$ ，以下会始终沿用这个记号。

引理 3 记 $\bar{h} = h \oplus 1^n$ 表示 h 的按位取反，那么任意算符 $F(O, \Gamma, \Delta) \in B_n$ 是 $B_n(\bar{h}, \sigma)$ 中的元素，当且仅当 Γ, Δ 对于 h, σ 满足 **C1-C5**，此外还存在关系

$$B_n(\bar{h}, \sigma) \cap B_n(h, \sigma) = \mathcal{P}_n \quad (6)$$

引理 4 任意算符 $F \in B_n$ 都可以被唯一写成 $F = F_L F_R$ ，其中 $F_R \in B_n(h, \sigma)$ ， $F_L \in B_n(\bar{h}, \sigma)$ 且 Pauli 部分是平凡的。

可以意识流地构想一下上述结论是如何导出 Canonical form 并证明唯一性的：首先，定理 2 指出可以对 C_n 中任意元素作形如 $B_n W B_n$ 的分解，且 W 是唯一确定的；引理 3 指出了一项重要结论——**C1-C5** 把 Canonical form 中的前一个 F 限制在了 B_n 的一个子群 $B_n(\bar{h}, \sigma)$ 中，引理 4 则说明了 Canonical form 的存在性，而唯一性证明则是由 F_L 的平凡 Pauli 部分以及 eq. (6) 引出的。

接下来我们通过上述结论形式化地证明一下定理 1。由定理 2 知任意 $U \in C_n$ 可以被写成 $U = LWR$ ，其中 $L, R \in B_n$ ，且 W 是唯一确定的。根据引理 4， L 可以被进一步分解为 $L = BC$ ，其中 $C \in B_n(h, \sigma)$ ， $B \in B_n(\bar{h}, \sigma)$ 且 Pauli 部分平凡，因此有

$$U = LWR = BCWR = BWW^{-1}CWR = BWC'R \quad (7)$$

根据 $B_n(h, \sigma)$ 的定义，有 $C' \triangleq W^{-1}CW \in B_n$ ，因而 $C'R \in B_n$ ，这证明了 Canonical form 的存在性。至于唯一性，设

$$F_1 W F_1' = F_2 W F_2' \quad (8)$$

满足 $F_1', F_2' \in B_n$ ， $F_1, F_2 \in B_n(\bar{h}, \sigma)$ 且 Pauli 部分平凡，通过对 eq. (8) 的一些变形

$$W^{-1}(F_2^{-1}F_1)W = F_2'(F_1')^{-1} \in B_n \quad (9)$$

根据 $B_n(h, \sigma)$ 的定义我们可以得到 $F_2^{-1}F_1 \in B_n(h, \sigma)$ ，故 $F_2^{-1}F_1 \in B_n(\bar{h}, \sigma) \cap B_n(h, \sigma) = \mathcal{P}_n$ ，但两者均只有平凡的 Pauli 部分，这说明了 $F_2^{-1}F_1 = I$ ，从而 $F_1 = F_2, F_1' = F_2'$ ，唯一性得证。■

接下来我们将重点讨论两个重要引理的证明。当然和之前一样，只展示核心思路，具体细节会被放在附录中。

3.1 引理 3 的证明

证明“当且仅当”的工作就是证明两个方向的蕴含关系。先考虑“ \Leftarrow ”即充分性，也即证明只要 Γ, Δ 对于 h, σ 满足 **C1-C5**，就可以使 $F(O, \Gamma, \Delta) \in B_n(\bar{h}, \sigma)$ 。由于 F 总可以被拆解成若干单 Clifford 门的乘积的形式，因此我们只需要验证 B_n 生成元集合中的每一个元素—— $X, S, CZ, CNOT^\dagger$ ——满足条件即可。列举出所有情况即可。

然后考虑“ \Rightarrow ”即必要性。记 $B'_n(h, \sigma)$ 表示对于 \bar{h}, σ 满足 **C1-C5** 的算符集合⁵，充分性的证明工作说明了 $B'_n(h, \sigma) \subseteq B_n(h, \sigma)$ ，我们现在希望能得到 $B'_n(h, \sigma) = B_n(h, \sigma)$ 。采取的方法是对集合元素计数，我们有如下的集合大小关系

$$|C_n| \leq \sum_{h \in \{0,1\}^n} \sum_{\sigma \in S_n} \frac{|B_n|^2}{|B_n(h, \sigma)|} \leq \sum_{h \in \{0,1\}^n} \sum_{\sigma \in S_n} \frac{|B_n|^2}{|B'_n(h, \sigma)|} \quad (10)$$

想要证明 $|B'_n(h, \sigma)| = |B_n(h, \sigma)|$ ，可以考虑直接证明右侧和式的值就等于 $|C_n|$ 。根据 $B'_n(h, \sigma)$ 的定义，我们知道

$$|B'_n(h, \sigma)| = |B_n| 2^{-I_n(h, \sigma)} \quad (11)$$

⁵这里还没有指出是 $B'_n(h, \sigma)$ 一个群。

其中 $I_n(h, \sigma)$ 表示 \bar{h}, σ 通过 **C1-C5** 给到 Γ, Δ 的限制数目。可以验证

$$I_n(h, \sigma) = \frac{n(n-1)}{2} + |h| + \sum_{1 \leq i < j \leq n: \sigma(i) < \sigma(j)} (-1)^{h_i+1} \quad (12)$$

通过 eq. (12) 我们将会证明 $|\mathcal{C}_n| = \sum_{h \in \{0,1\}^n} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_n} \frac{|\mathcal{B}_n|^2}{|\mathcal{B}'_n(h, \sigma)|}$, 从而得到引理 3 的必要性作为结论。此外还需要证明 eq. (6): 可以验证 $\mathcal{B}'_n(h, \sigma) \cap \mathcal{B}'_n(\bar{h}, \sigma) = \mathcal{P}_n$ ——因为同时满足对 (h, σ) 与 (\bar{h}, σ) 满足 **C1-C5** 会直接导致 $\Gamma = \Delta = 0^{n \times n}$ ——那么结合前面的论述就可以得到 eq. (6) 了。本部分的具体论证细节将在 section C 中给出。

3.2 引理 4 的证明

记 F_1, F_2, \dots, F_m 为 $\mathcal{B}_n(\bar{h}, \sigma)$ 中所有 Pauli 部分平凡的元素排成一列, 显然有 $m = |\mathcal{B}_n(\bar{h}, \sigma)/\mathcal{P}_n| = 4^{-n} |\mathcal{B}_n(\bar{h}, \sigma)|$ 。我们声称所有左陪集 $F_j \mathcal{B}_n(h, \sigma)$ 是两两不交的, 这指出了分解的唯一性。而要证明存在性, 可以考虑对集合元素计数, 具体地, 需要验证

$$|\mathcal{B}_n(h, \sigma)| \cdot |\mathcal{B}_n(\bar{h}, \sigma)| = |\mathcal{P}_n| \cdot |\mathcal{B}_n| = 4^n |\mathcal{B}_n| \quad (13)$$

注意到 $|\mathcal{B}_n| = 2^{n^2+2n}$ 以及 $|\mathcal{B}_n(h, \sigma)| = |\mathcal{B}_n| 2^{-I_n(h, \sigma)}$, 而又可以验证 $I_n(h, \sigma) + I_n(\bar{h}, \sigma) = n^2$, 代入后能直接发现 eq. (13) 成立, 从而完成证明。细节可见 section D。

4 第三部分

现在我们可以通过对 Canonical form 作随机采样来实现对 Clifford group 的随机采样了。采样的过程分为两部分, 注意到 \mathcal{C}_n 是 $\mathcal{B}_n W \mathcal{B}_n$ 的不交并, 我们可以先按照一定的概率分布采样 W , 也即采样 $h \in \{0,1\}^n, \sigma \in \mathcal{S}_n$ 。具体地, 这个概率分布为

$$P_n(h, \sigma) = \frac{|\mathcal{B}_n W \mathcal{B}_n|}{|\mathcal{C}_n|} = \frac{|\mathcal{B}_n|^2}{|\mathcal{B}_n(h, \sigma)| \cdot |\mathcal{C}_n|} = \frac{2^{I_n(h, \sigma)}}{\sum_{h, \sigma} 2^{I_n(h, \sigma)}} \quad (14)$$

eq. (14) 的形式与一种被称为 Mallows distribution [4] 的概率分布类似, 这里 [2] 的作者将其称为 quantum Mallows distribution。可以证明这个采样过程可以被如下的算法实现

Algorithm 1 根据 quantum Mallows distribution $P_n(h, \sigma)$ 来生成 h, σ

```

1:  $A \leftarrow [1 \dots n]$ 
2: for  $i = 1$  to  $n$  do
3:    $m \leftarrow |A|$ 
4:   Sample  $h_i \in \{0, 1\}$  and  $k \in [1 \dots m]$  from the probability distribution

```

$$p(h_i, k) = \frac{2^{m-1+h_i+(m-k)(-1)^{1+h_i}}}{4^m - 1}$$

```

5:   Let  $j$  be the  $k$ -th largest element of  $A$ 
6:    $\sigma(i) \leftarrow j$ 
7:    $A \leftarrow A \setminus \{j\}$ 
8: end for
9: return  $(h, \sigma)$ 

```

引理 5 上述算法可以正确地按照 $P_n(h, \sigma)$ 的分布来采样 h, σ , 同时运行时间为 $\tilde{O}(n)$ ⁶。

证明用的是归纳, 与引理 3 中证明 $|\mathcal{C}_n| = \sum_{h, \sigma} \frac{|\mathcal{B}_n|^2}{|\mathcal{B}'_n(h, \sigma)|}$ 的方法类似, 详细可参考 section E。

在得到 W 之后, 下一步是对左右两侧的 \mathcal{B}_n 进行采样。这个过程只需要按照 Canonical form eq. (3) 对 $\Gamma, \Delta, O', \Gamma', \Delta'$ 进行采样即可, 因此是简单的。代码展示在 section F 中。

值得注意的是, 即使去掉 Canonical form eq. (3) 中对 Γ, Δ 的限制 (**C1-C5**), 即把算符 F 的限制从 $\mathcal{B}_n/\mathcal{B}_n(h, \sigma) \cong \mathcal{B}_n(\bar{h}, \sigma)/\mathcal{P}_n$ 扩展到 $\mathcal{B}_n/\mathcal{P}_n$, 得到的采样结果也仍是均匀分布的。这有赖于群论中的 Lagrange 定理 [5], 它指出了子群的每一个陪集的大小都是相同的。Qiskit 中所实现的 `random_clifford` 方法就采用了这种策略, 这使得程序变得更加简短, 实现效率上也有所提升, 代价则是消耗了更多的随机比特。

⁶渐进复杂度记号 \tilde{O} (tilde big-O) 表示忽略对数因子, 即 $\tilde{O}(n) = O(n \log^k n)$ 。

参考文献

- [1] Robert Koenig and John A. Smolin. How to efficiently select an arbitrary clifford group element. *Journal of Mathematical Physics*, 55(12):122202, 2014.
- [2] Sergey Bravyi and Dmitri Maslov. Hadamard-free circuits expose the structure of the clifford group. *IEEE Transactions on Information Theory*, 67(7):4546–4563, Jul 2021.
- [3] Dmitri Maslov and Martin Roetteler. Shorter stabilizer circuits via bruhat decomposition and quantum circuit transformations. *IEEE Transactions on Information Theory*, 64(7):4729–4738, Jul 2018.
- [4] Tyler Lu and Craig Boutilier. Learning mallows models with pairwise preferences. In *Proceedings of the 28th International Conference on International Conference on Machine Learning*, ICML’11, page 145–152, Madison, WI, USA, 2011. Omnipress.
- [5] Wikipedia contributors. Lagrange’s theorem (group theory) — Wikipedia, the free encyclopedia. [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Lagrange%27s_theorem_\(group_theory\)&oldid=1039199376](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Lagrange%27s_theorem_(group_theory)&oldid=1039199376), 2021. [Online; accessed 11-December-2021].

附录

A 引理 1 的详细证明

U	g	UgU^\dagger
controlled-NOT	X_1	X_1X_2
	X_2	X_2
	Z_1	Z_1
	Z_2	Z_1Z_2
Hadamard H	X	Z
	Z	X
phase S	X	Y
	Z	Z

表 1: 验证 Clifford 门都是 \mathcal{P}_n 的正规化子

B 引理 2 的详细证明

B.1 第一步

先假设正规化子 U 满足 $UZU^\dagger = Z$, 那么 $UZ = ZU$ 由此说明 U, Z 对易, 从而 U 只能有非零对角元

$$U = e^{i\theta} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

因为 U 是正规化子, 我们也有

$$UXU^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} \in \{\pm X, \pm iX, \pm Y, \pm iY\}$$

那么 $e^{i\phi} \in \{\pm 1, \pm i\}$, 这说明 U 可以由相位门 S 实现, 至多差一个 global phase.

现在考虑更一般的情况。对于任意的 $U \in \mathcal{N}(\mathcal{P}_1)$, 必然存在一个 $g \in \mathcal{P}_1 \setminus \{\pm I, \pm iI\}$ 满足 $UgU^\dagger = Z$ 。注意到 $HXH^\dagger = Z, (HS)Y(HS)^\dagger = -Z$, 因此总可以找到一个由 Hadamard 门与相位门组成的 V , 满足 $VgV^\dagger \in \{\pm Z, \pm iZ\}$ 。把 U 写为 $U = U_1V$, 那么 $Z = UgU^\dagger = U_1VgV^\dagger U_1^\dagger \in \{\pm U_1ZU_1^\dagger, \pm iU_1ZU_1^\dagger\}$, 根据之前的论述, U_1 可以由相位门实现, 至多差一个 global phase, 因此 $U = U_1V$ 可以由 $O(1)$ 个 Hadamard 门和相位门实现, 至多差一个 global phase。

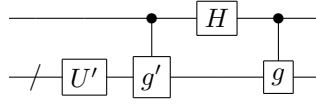


图 1: 证明中构造的量子线路

B.2 第二步

考虑图 1 中的量子线路，其中 U' 定义为满足 $U'|\psi\rangle = \sqrt{2}\langle 0|U(|0\rangle \otimes |\psi\rangle)$ 的算符。这里假设对于某个 $g, g' \in \mathcal{P}_n$ ，有

$$\begin{aligned} UZ_1U^\dagger &= X_1 \otimes g \\ UX_1U^\dagger &= Z_1 \otimes g' \end{aligned} \quad (15)$$

注意到两个等式的左侧都是 Hermitian 的，我们有 $g = g^\dagger, g' = g'^\dagger$ 。

我们证明这个量子线路实现的算符——姑且称之为 \tilde{U} ——与 U 是等价的，且可以由 $O(n^2)$ 个 Clifford 门组合实现。首先，我们可以写出 eq. (15) 的一些变式

$$U = (X_1 \otimes g)UZ_1 \quad (16)$$

$$= (Z_1 \otimes g')UX_1 \quad (17)$$

$$= (Z_1X_1 \otimes g'g)U(Z_1X_1) \quad (18)$$

将其代入 $U'|\psi\rangle = \sqrt{2}\langle 0|U(|0\rangle \otimes |\psi\rangle)$ 后可以得到

$$U'|\psi\rangle = \sqrt{2}\langle 0|U(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) \quad (19)$$

$$= \sqrt{2}\langle 1|gU(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) \quad (20)$$

$$= \sqrt{2}\langle 0|g'U(|1\rangle \otimes |\psi\rangle) \quad (21)$$

$$= -\sqrt{2}\langle 1|g'gU(|1\rangle \otimes |\psi\rangle) \quad (22)$$

为了说明 $\tilde{U} = U$ ，我们其实只需要说明对于任意的 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \{|0\rangle, |1\rangle\}$ ，都满足 $\langle \alpha|\tilde{U}(|\beta\rangle \otimes |\psi\rangle) = \langle \alpha|U(|\beta\rangle \otimes |\psi\rangle)$ ，于是

$$\begin{aligned} \langle 0|\tilde{U}(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) &= \langle 0|(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes U'|\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes gU'|\psi\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}U'|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \sqrt{2}\langle 0|U(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) \\ &= \langle 0|U(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \langle 1|\tilde{U}(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) &= \langle 1|(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes U'|\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes gU'|\psi\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}gU'|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}g \cdot \sqrt{2}\langle 1|gU(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) \\ &= \langle 1|U(|0\rangle \otimes |\psi\rangle) \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \langle 0|\tilde{U}(|1\rangle \otimes |\psi\rangle) &= \langle 0|(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes g'U'|\psi\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes gg'U'|\psi\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}g'U'|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}g' \cdot \sqrt{2}\langle 0|g'U(|1\rangle \otimes |\psi\rangle) \\ &= \langle 0|U(|1\rangle \otimes |\psi\rangle) \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \langle 1|\tilde{U}(|1\rangle \otimes |\psi\rangle) &= \langle 1|(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes g'U'|\psi\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes gg'U'|\psi\rangle) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}gg'U'|\psi\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}gg' \cdot -(\sqrt{2}\langle 1|g'gU(|1\rangle \otimes |\psi\rangle)) \\ &= \langle 1|U(|1\rangle \otimes |\psi\rangle) \end{aligned} \quad (26)$$

σ	σ'	选取的 V
X	Y	HS
X	Z	I
Y	X	SH
Y	Z	S
Z	X	H
Z	Y	HS

表 2: 验证不同的 Pauli 矩阵 σ, σ' 总可以被 H, S 的乘积共轭变换到 X, Z

由此我们证明了 $\tilde{U} = U$ 。注意到以上线路除了 U' 外, 只包含一个 controlled- g' 门、一个 Hadamard 门和一个 controlled- g 门, 而任意的 controlled- $\{X, Y, Z\}$ 门都是可以由 $O(1)$ 个 Clifford 门实现的, 因此整个线路除了 U' 外, 可以通过 $O(n) + 1 + O(n) = O(n)$ 个 Clifford 门来实现。

结合归纳假设, 我们证明了满足 eq. (15) 的 U 可以被 $O(n^2) + O(n) = O(n^2)$ 个 Clifford 门组合实现。

B.3 第三步

我们希望把第二步中的结果推广。考虑任意的 $U \in \mathcal{N}(\mathcal{P}_{n+1})$, 记 $G = UZ_1U^\dagger, G' = UX_1U^\dagger$, 那么显然有 $G, G' \in \mathcal{P}_{n+1}$ 。注意到 G 与 G' 必须反对易——因为 Z 与 X 就是反对易的——那么必然存在某个 $j \in [1, n+1]$ 使得 G 与 G' 在第 j 个量子比特上作用了 $\{X, Y, Z\}$ 中不同的门, 分别记为 σ 与 σ' 。额外添加第一个量子比特与第 j 个量子比特之间的交换门⁷, 可以得到

$$\begin{aligned} (\text{SWAP}_{1,j}U)Z_1(\text{SWAP}_{1,j}U)^\dagger &= \text{SWAP}_{1,j} \cdot G \cdot \text{SWAP}_{1,j}^\dagger = \sigma \otimes g \\ (\text{SWAP}_{1,j}U)X_1(\text{SWAP}_{1,j}U)^\dagger &= \text{SWAP}_{1,j} \cdot G' \cdot \text{SWAP}_{1,j}^\dagger = \sigma' \otimes g' \end{aligned} \quad (27)$$

其中 $g, g' \in \mathcal{P}_n$ 。值得一提的是, 对于 Pauli 矩阵 σ, σ' , 总会存在由 Hadamard 门与相位门组成的 V , 满足 $V\sigma V^\dagger = X, V\sigma' V^\dagger = Z$, 至多差一个 global phase。这个结论可以通过表 2 来验证

因此进一步地, 我们可以得到

$$\begin{aligned} (V_1\text{SWAP}_{1,j}U)Z_1(V_1\text{SWAP}_{1,j}U)^\dagger &= V_1\text{SWAP}_{1,j} \cdot G \cdot \text{SWAP}_{1,j}^\dagger V_1^\dagger = V_1\sigma V_1^\dagger \otimes g = X \otimes g \\ (V_1\text{SWAP}_{1,j}U)X_1(V_1\text{SWAP}_{1,j}U)^\dagger &= V_1\text{SWAP}_{1,j} \cdot G' \cdot \text{SWAP}_{1,j}^\dagger V_1^\dagger = V_1\sigma' V_1^\dagger \otimes g' = Z \otimes g' \end{aligned} \quad (28)$$

其中 V 的下标表示 V 作用在第一个量子比特上。根据第二步中的结论, 我们知道 $V_1\text{SWAP}_{1,j}U$ 可以由 $O(n^2)$ 个 Clifford 门实现, 注意到 $(V_1\text{SWAP}_{1,j})^\dagger$ 仅包含 $O(1)$ 个 Clifford 门, 这说明了任意的 $U \in \mathcal{N}(\mathcal{P}_{n+1})$ 都可以由 $O(n^2)$ 个 Clifford 门实现, 至多差一个 global phase。

C 引理 3 的详细证明

C.1 充分性证明

为了方便起见, 我们用 $\bar{h} = h \oplus 1^n$ 代替 h 来改写一下定理 1 中的 **C1-C5**:

- B1** 若 $h_i = 1, h_j = 1$, 则 $\Gamma_{i,j} = 0$;
- B2** 若 $h_i = 0, h_j = 1, \sigma(i) > \sigma(j)$, 则 $\Gamma_{i,j} = 0$;
- B3** 若 $h_i = 1, h_j = 1, \sigma(i) > \sigma(j)$, 则 $\Delta_{i,j} = 0$;
- B4** 若 $h_i = 0, h_j = 0, \sigma(i) < \sigma(j)$, 则 $\Delta_{i,j} = 0$;
- B5** 若 $h_i = 0, h_j = 1$, 则 $\Delta_{i,j} = 0$ 。

现在, 我们证明对于满足上述条件的 Γ, Δ , 都有 $F(O, \Gamma, \Delta) \in \mathcal{B}(h, \sigma)$ 即 $W^{-1}FW \in \mathcal{B}_n$ 。先验证对于 \mathcal{B}_n 的生成元集 $\{X, S, \text{CNOT}^\dagger, \text{CZ}\}$, 上述叙述成立:

1. $F = X_i$ 。可以验证此时 $W^{-1}FW$ 一定是 Pauli 算符 (注意到 $HX_iH = Z_i$), 因此是 \mathcal{B}_n 中的元素。

⁷交换门 SWAP 可以由被三个 CNOT 门实现, 因此是 Clifford 算符, 自然也是 \mathcal{P}_{n+1} 的正规化子。

2. $F = S_i$ 。此时 $W^{-1}FW = \begin{cases} S_{\sigma(i)}, & h_i = 0 \\ H_{\sigma(i)}S_{\sigma(i)}H_{\sigma(i)}, & h_i = 1 \end{cases}$, 注意到 S_i 的存在表明 $\Gamma_{i,i} = 1$, 从而根据 **B1** 有 $h_i = 0$, 此时 $W^{-1}FW = S_{\sigma(i)} \in \mathcal{B}(h, \sigma)$ 。

3. $F = \text{CNOT}_{i,j}$, 其中 $i < j$, 此时有 $\Delta_{j,i} = 1$ 。根据 h_i, h_j 的不同取值可以得到如下表格

h_i	h_j	$W^{-1}\text{CNOT}_{i,j}W$
0	0	$\text{CNOT}_{\sigma(i),\sigma(j)}$
0	1	$\text{CZ}_{\sigma(i),\sigma(j)}$
1	0	$(H \otimes I \cdot \text{CNOT} \cdot H \otimes I)_{\sigma(i),\sigma(j)}$
1	1	$\text{CNOT}_{\sigma(j),\sigma(i)}$

观察到 **B1-B5** 在 $\Delta_{j,i} = 1$ 时否定了如下几种情况: $h_i = h_j = 1$ 且 $\sigma(j) > \sigma(i)$; $h_i = h_j = 0$ 且 $\sigma(i) > \sigma(j)$; $h_i = 1$ 且 $h_j = 0$ 。可以发现除了这些情况外, $W^{-1}FW \in \mathcal{B}(h, \sigma)$ 总是成立的。

4. $F = \text{CZ}_{i,j}$, 此时有 $\Gamma_{i,j} = \Gamma_{j,i} = 1$ 根据 h_i, h_j 的不同取值可以得到如下表格

h_i	h_j	$W^{-1}\text{CNOT}_{i,j}W$
0	0	$\text{CZ}_{\sigma(i),\sigma(j)}$
0	1	$\text{CNOT}_{\sigma(i),\sigma(j)}$
1	0	$\text{CNOT}_{\sigma(j),\sigma(i)}$
1	1	$(H \otimes I \cdot \text{CNOT} \cdot H \otimes I)_{\sigma(i),\sigma(j)}$

观察到 **B1-B5** 在 $\Gamma_{i,j} = \Gamma_{j,i} = 1$ 时否定了如下几种情况: $h_i = h_j = 1$; $h_i = 0, h_j = 1$ 且 $\sigma(i) > \sigma(j)$; $h_i = 1, h_j = 0$ 且 $\sigma(j) > \sigma(i)$ 。可以发现除了这些情况外, $W^{-1}FW \in \mathcal{B}(h, \sigma)$ 总是成立的。

对于任意满足上述条件的 $F(O, \Gamma, \Delta)$, 由于其一定可以分解成 $\{X, S, \text{CNOT}^\dagger, \text{CZ}\}$ 乘积的形式, 从而也可以验证 $W^{-1}FW \in \mathcal{B}_n$, 这证明了引理的充分性。

C.2 必要性证明

我们先验证 eq. (12) 的结论: $I_n(h, \sigma)$ 是 \bar{h}, σ 通过 **C1-C5** 给 Γ, Δ 的限制数目, 也就等于 h, σ 通过 **B1-B5** 给 Γ, Δ 的限制数目。为了方便我们沿用后者, 并且可以显式地把限制数目写下来

	给 Γ, Δ 的限制数目	记号
B1	$ h + \sum_{i>j} h_i h_j$	$ h + \textcircled{1}$
B2	$\sum_{i>j, \sigma(i)>\sigma(j)} \bar{h}_i h_j + \sum_{i>j, \sigma(i)<\sigma(j)} h_i \bar{h}_j$	$\textcircled{2} + \textcircled{3}$
B3	$\sum_{i>j, \sigma(i)>\sigma(j)} h_i h_j$	$\textcircled{4}$
B4	$\sum_{i>j, \sigma(i)<\sigma(j)} \bar{h}_i \bar{h}_j$	$\textcircled{5}$
B5	$\sum_{i>j} \bar{h}_i h_j$	$\textcircled{6}$

简单验证一下上面的六项加起来就能够得到 eq. (12):

$$\begin{aligned}
I_n(h, \sigma) &= |h| + \textcircled{1} + \textcircled{2} + \textcircled{3} + \textcircled{4} + \textcircled{5} + \textcircled{6} \\
&= |h| + (\textcircled{1} + \textcircled{6}) + (\textcircled{2} + \textcircled{4}) + (\textcircled{3} + \textcircled{5}) \\
&= |h| + \sum_{i>j} h_j + \sum_{i>j, \sigma(i)>\sigma(j)} h_j + \sum_{i>j, \sigma(i)<\sigma(j)} \bar{h}_j \\
&= |h| + \sum_{i>j} h_j + \sum_{i>j} \bar{h}_j + \sum_{i>j, \sigma(i)>\sigma(j)} h_j - \bar{h}_j \\
&= \frac{n(n-1)}{2} + |h| + \sum_{1 \leq i < j \leq n: \sigma(i) < \sigma(j)} (-1)^{1+h_i}
\end{aligned} \tag{29}$$

根据 [1], 我们知道 $|\mathcal{C}_n| = 2^{n^2+2n} \prod_{i=1}^n (4^i - 1)$, 回忆 $|\mathcal{B}_n| = 2^{n^2+2n}$, 为了完成证明, 我们只需要验证如下等式成立

$$F(n) \triangleq \sum_{h \in \{0,1\}^n} \sum_{\sigma \in S_n} 2^{I_n(h, \sigma)} = \prod_{i=1}^n (4^i - 1) \tag{30}$$

这里的证明手段是归纳。 $n = 1$ 时, σ 一定是单位置换 e , $I_1(0, e) = 0, I_1(1, e) = 1$ 而 $F(1) = 3 = 2^{I_1(0, e)} + 2^{I_1(1, e)}$, 故成立。

假设结论 eq. (30) 对于 n 成立。对于任意的 $h \in \{0, 1\}^{n+1}$ 以及 $\sigma \in \mathcal{S}_{n+1}$, 将 h 写成 $h = (h_1, h')$ 的形式, 其中 $h' \in \{0, 1\}^n$; 取 $\sigma' \in \mathcal{S}_n$ 满足 $\sigma'(j) = \begin{cases} \sigma(j+1), & \sigma(j+1) < \sigma(1) \\ \sigma(j+1) - 1, & \sigma(j+1) > \sigma(1) \end{cases}$ (相当于移除 σ 的第一位后得到新的 n 阶排列), 可以通过验证得到

$$I_{n+1}(h, \sigma) = I_n(h', \sigma') + n + h_1 + (n+1 - \sigma(1))(-1)^{1+h_1} \quad (31)$$

注意到映射 $(h, \sigma) \rightarrow (h_1, h', \sigma(1), \sigma')$ 是一一对应的, 因此

$$\begin{aligned} F(n+1) &= F(n) \sum_{h_1 \in \{0, 1\}} \sum_{\sigma(1)=1}^{n+1} 2^{n+h_1+(n+1-\sigma(1))(-1)^{1+h_1}} \\ &= F(n) \cdot 2^n \sum_{m=1}^{n+1} (2^{-n-1+m} + 2^{n-m+2}) \\ &= F(n) \cdot 2^n \sum_{m=-n}^{n+1} 2^m \\ &= F(n) \cdot 2^n (2^{n+2} - 2^{-n}) \\ &= (4^{n+1} - 1)F(n) \end{aligned} \quad (32)$$

从而证明了 eq. (30) 对于任何 n 都成立, 同时也完成了引理的必要性证明。

D 引理 4 的详细证明

只需要补充说明所有左陪集 $F_j \mathcal{B}_n(h, \sigma)$ 是两两不交的即可。假设对于 $F_i \neq F_j$ 有 $F_i \mathcal{B}_n(h, \sigma) \cap F_j \mathcal{B}_n(h, \sigma) \neq \emptyset$, 这就说明 $F_j^{-1} F_i \in \mathcal{B}_n(h, \sigma)$, 然而 $F_i, F_j \in \mathcal{B}(\bar{h}, \sigma)$ 故 $F_j^{-1} F_i \in \mathcal{B}(\bar{h}, \sigma)$, 根据引理 3 可知 $F_j^{-1} F_i \in \mathcal{P}_n$ 。注意到定义指出 F_i, F_j 的 Pauli 部分都是平凡的, 这导致了 $F_j^{-1} F_i = I$ 即 $F_i = F_j$, 产生矛盾。故左陪集两两不交。

E 引理 5 的详细证明

首先考察该算法的正确性, 即验证其确实按照 $P_n(h, \sigma)$ 的概率分布来生成了 h 和 σ 。考虑对 n 归纳: $n=1$ 时, 有 $P_1(0, e) = p(0, 1) = \frac{1}{3}, P_1(1, e) = p(1, 1) = \frac{2}{3}$, 因此该算法按照 $P_1(h, \sigma)$ 的概率分布生成了 h 和 σ ; $n > 1$ 时, 考虑在 section C 中使用过的分解, 即对于 h, σ 构造 h', σ' , 由于 $I_n(h, \sigma) = I_{n-1}(h', \sigma') + (n-1) + h_1 + (n - \sigma(1))(-1)^{1+h_1}$, 故一轮循环实质上按照正确的概率生成了 h_1 和 $\sigma(1)$, 注意到 $(h, \sigma) \rightarrow (h_1, h', \sigma(1), \sigma')$ 的一一对应关系, 只需要在接下来的循环中生成 h', σ' 即可。结合归纳假设, 算法的正确性得证。

关于算法的复杂度, 我们证明单轮循环 (即单次对 $h_1, \sigma(1)$ 的采样) 的复杂度为 $\tilde{O}(1)$ 。考虑按照一定顺序写下 $\{0, 1\} \times [1, m]$ 中的所有有序对

$$P \triangleq [p(1, 1), p(1, 2), \dots, p(1, m), p(0, m), p(0, m-1), \dots, p(0, 1)] \quad (33)$$

可以验证 P 作为一个数组 (也可以视作概率分布) 满足

$$P_a = \frac{2^{2m-1-a}}{2^{2m}-1}, a \in [0, 2m-1] \quad (34)$$

因此想要实现对概率分布 P 的随机采样, 只需要令

$$a = 2m - \lceil \log_2(r(2^{2m} - 1) + 1) \rceil \quad (35)$$

其中 $r \in [0, 1]$ 是一个均匀随机分布的实数。因此, 一轮循环需要消耗 $O(\log n)$ 个随机比特, 同时运行时间为 $\tilde{O}(1)$ 。

F 代码实现

代码实现主要参考自 [Qiskit](#), 修改了对 eq. (3) 中算符 F 的采样方式, 即严格按照 **C1-C5** 的限制对 Γ, Δ 进行采样。

```
1 import numpy as np
2 from numpy.random import default_rng
3 from qiskit.quantum_info import Clifford, StabilizerTable, random_clifford
4
```

```

5  def my_random_clifford(num_qubits, seed=None):
6      """
7      Return a random Clifford operator, minimizing the number of random bits used.
8      Args:
9          num_qubits (int): the number of qubits for the Clifford
10         seed (int or np.random.Generator): Optional. Set a fixed seed or generator for RNG.
11     Returns:
12         Clifford: a random Clifford operator.
13     """
14     if seed is None:
15         rng = np.random.default_rng()
16     elif isinstance(seed, np.random.Generator):
17         rng = seed
18     else:
19         rng = default_rng(seed)
20
21     had, perm = _sample_qmallows(num_qubits, rng)
22     gamma1, delta1, gamma2, delta2 = _generate_tril(had, perm, rng)
23
24     # For large num_qubits numpy.inv function called below can
25     # return invalid output leading to a non-symplectic Clifford
26     # being generated. This can be prevented by manually forcing
27     # block inversion of the matrix.
28     block_inverse_threshold = 50
29
30     # Compute stabilizer table
31     zero = np.zeros((num_qubits, num_qubits), dtype=np.int8)
32     prod1 = np.matmul(gamma1, delta1) % 2
33     prod2 = np.matmul(gamma2, delta2) % 2
34     inv1 = _inverse_tril(delta1, block_inverse_threshold).transpose()
35     inv2 = _inverse_tril(delta2, block_inverse_threshold).transpose()
36     table1 = np.block([[delta1, zero], [prod1, inv1]])
37     table2 = np.block([[delta2, zero], [prod2, inv2]])
38
39     # Apply qubit permutation
40     table = table2[np.concatenate([perm, num_qubits + perm])]
41
42     # Apply layer of Hadamards
43     inds = had * np.arange(1, num_qubits + 1)
44     inds = inds[inds > 0] - 1
45     lhs_inds = np.concatenate([inds, inds + num_qubits])
46     rhs_inds = np.concatenate([inds + num_qubits, inds])
47     table[lhs_inds, :] = table[rhs_inds, :]
48
49     # Apply table
50     table = np.mod(np.matmul(table1, table), 2).astype(bool)
51
52     # Generate random phases
53     phase = rng.integers(2, size=2 * num_qubits).astype(bool)
54     return Clifford(StabilizerTable(table, phase))
55

```

```

56 def _generate_tril(had, perm, rng):
57     """
58     Return four 01-matrices gamma1, delta1, gamma2, delta2, minimizing the number of random bits used.
59     Args:
60         had: the Hadamard layer
61         perm: the permutation layer
62         both of them put some restrictions on gamma1 and delta1
63         rng: random number generator
64     Returns:
65         four 01-matrices gamma1, delta1, gamma2, delta2 for Clifford sampling.
66     """
67
68     num_qubits = had.size
69
70     gamma1 = np.diag(rng.integers(2, size=num_qubits, dtype=np.int8))
71     gamma2 = np.diag(rng.integers(2, size=num_qubits, dtype=np.int8))
72     delta1 = np.eye(num_qubits, dtype=np.int8)
73     delta2 = delta1.copy()
74
75     for i in range(num_qubits):
76         for j in range(i):
77             gamma2[i, j] = gamma2[j, i] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
78             delta2[i, j] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
79
80             # restrictions for gamma1
81             if had[i] == 1 and had[j] == 1:
82                 gamma1[i, j] = gamma1[j, i] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
83             if had[i] == 1 and had[j] == 0 and perm[i] < perm[j]:
84                 gamma1[i, j] = gamma1[j, i] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
85             if had[i] == 0 and had[j] == 1 and perm[i] > perm[j]:
86                 gamma1[i, j] = gamma1[j, i] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
87
88             # restrictions for delta1
89             if had[i] == 0 and had[j] == 1:
90                 delta1[i, j] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
91             if had[i] == 1 and had[j] == 1 and perm[i] > perm[j]:
92                 delta1[i, j] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
93             if had[i] == 0 and had[j] == 0 and perm[i] < perm[j]:
94                 delta1[i, j] = rng.integers(2, dtype=np.int8)
95
96     return gamma1, delta1, gamma2, delta2
97
98 def _sample_qmallows(n, rng=None):
99     """Sample from the quantum Mallows distribution."""
100
101     if rng is None:
102         rng = np.random.default_rng()
103
104     # Hadmard layer
105     had = np.zeros(n, dtype=bool)
106

```

```

107     # Permutation layer
108     perm = np.zeros(n, dtype=int)
109
110     inds = list(range(n))
111     for i in range(n):
112         m = n - i
113         eps = 4 ** (-m)
114         r = rng.uniform(0, 1)
115         index = -int(np.ceil(np.log2(r + (1 - r) * eps)))
116         had[i] = index < m
117         if index < m:
118             k = index
119         else:
120             k = 2 * m - index - 1
121         perm[i] = inds[k]
122         del inds[k]
123     return had, perm
124
125 def _inverse_tril(mat, block_inverse_threshold):
126     """Invert a lower-triangular matrix with unit diagonal."""
127     # Optimized inversion function for low dimensions
128     dim = mat.shape[0]
129
130     if dim <= 2:
131         return mat
132
133     if dim <= 5:
134         inv = mat.copy()
135         inv[2, 0] = mat[2, 0] ^ (mat[1, 0] & mat[2, 1])
136         if dim > 3:
137             inv[3, 1] = mat[3, 1] ^ (mat[2, 1] & mat[3, 2])
138             inv[3, 0] = mat[3, 0] ^ (mat[3, 2] & mat[2, 0]) ^ (mat[1, 0] & inv[3, 1])
139         if dim > 4:
140             inv[4, 2] = (mat[4, 2] ^ (mat[3, 2] & mat[4, 3])) & 1
141             inv[4, 1] = mat[4, 1] ^ (mat[4, 3] & mat[3, 1]) ^ (mat[2, 1] & inv[4, 2])
142             inv[4, 0] = (
143                 mat[4, 0]
144                 ^ (mat[1, 0] & inv[4, 1])
145                 ^ (mat[2, 0] & inv[4, 2])
146                 ^ (mat[3, 0] & mat[4, 3])
147             )
148         return inv % 2
149
150     # For higher dimensions we use Numpy's inverse function
151     # however this function tends to fail and result in a non-symplectic
152     # final matrix if n is too large.
153     if dim <= block_inverse_threshold:
154         return np.linalg.inv(mat).astype(np.int8) % 2
155
156     # For very large matrices we divide the matrix into 4 blocks of
157     # roughly equal size and use the analytic formula for the inverse

```

```

158     # of a block lower-triangular matrix:
159     # inv([[A, 0],[C, D]]) = [[inv(A), 0], [inv(D).C.inv(A), inv(D)]]
160     # call the inverse function recursively to compute inv(A) and invD
161
162     dim1 = dim // 2
163     mat_a = _inverse_tril(mat[0:dim1, 0:dim1], block_inverse_threshold)
164     mat_d = _inverse_tril(mat[dim1:dim, dim1:dim], block_inverse_threshold)
165     mat_c = np.matmul(np.matmul(mat_d, mat[dim1:dim, 0:dim1]), mat_a)
166     inv = np.block([[mat_a, np.zeros((dim1, dim - dim1), dtype=int)], [mat_c, mat_d]])
167     return inv % 2
168
169 if __name__ == "__main__":
170     circuit = random_clifford(4)
171     print(circuit)
172     circuit2 = my_random_clifford(4)
173     print(circuit2)

```