

Bits, bytes en batterijen

Citation for published version (APA):

Koelman, J. M. V. A. (2019). *Bits, bytes en batterijen*. Technische Universiteit Eindhoven.

Document status and date:

Gepubliceerd: 08/02/2019

Document Version:

Uitgevers PDF, ook bekend als Version of Record

Please check the document version of this publication:

- A submitted manuscript is the version of the article upon submission and before peer-review. There can be important differences between the submitted version and the official published version of record. People interested in the research are advised to contact the author for the final version of the publication, or visit the DOI to the publisher's website.
- The final author version and the galley proof are versions of the publication after peer review.
- The final published version features the final layout of the paper including the volume, issue and page numbers.

[Link to publication](#)

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal.

If the publication is distributed under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license above, please follow below link for the End User Agreement:

www.tue.nl/taverne

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us at:

openaccess@tue.nl

providing details and we will investigate your claim.

Prof.dr.ir. Vianney Koelman
8 februari 2019

INTREEREDE

Bits, bytes en batterijen

TU/e

**EINDHOVEN
UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY**

FACULTEIT TECHNISCHE NATUURKUNDE

INTREEREDE PROF.DR.IR. VIANNEY KOELMAN

Bits, bytes en batterijen

Uitgesproken op 8 februari 2019
aan de Technische Universiteit Eindhoven

Inleiding

Mijnheer de Rector Magnificus, zeer gewaardeerde collega's, beste familie en vrienden,

De mensheid staat voor een immense taak: de overstap naar een duurzaam energiesysteem. Hoe immens is deze uitdaging? Ik ga u niet vermoeien met terawatt-uren en petajoules. Noch ga ik u belasten met cijfers achter de komma. We gaan naar het grote plaatje kijken, en grove schattingen voldoen om dat plaatje te schetsen.

Ode aan olie

Wat is het aantal kilocalorieën dat per persoon per dag geproduceerd moet worden om onze samenleving draaiende te houden? Als ik deze vraag stel, krijg ik meestal het antwoord 2000 kCal. Ik verduidelijk dan dat we het gehele systeem moeten beschouwen en dat de kilocalorieën, die door inefficiënties en conversieverliezen in het productieproces verloren gaan, ook meetellen. Daarmee rekening houdend, komen we al snel uit op ongeveer 5000 kCal. Immers, de kilocalorieën die wij nuttigen door een glas melk of een biefstuk, vergen aanzienlijk meer kilocalorieën in de vorm van veevoer. De 5000 kCal per persoon per dag wordt dus geleverd door zowel akkers waarop gewassen verbouwd worden, als door weilanden waarop koeien grazen. Die dagelijkse 5000 kCal legt een grote claim op ons landgebruik. Het vertegenwoordigt de uitgestrekte landbouwgronden die zich voor je oog onttollen wanneer je per trein door het land reist.

Maar dat is slechts ons voedsel. We verbruiken ieder natuurlijk veel en veel meer. Denk aan de kilocalorieën die je in de vorm van energie consumeert. Denk aan je televisie en je koelkast, maar denk ook aan de kilocalorieën die je verbruikt om je huis warm te houden en om van A naar B te reizen. En vergeet niet de kilocalorieën die jouw supermarkt verbruikt om de diepvriespizza die jij morgen gaat kopen, gekoeld te houden. En vergeet evenmin de vrachtwagen die nu op weg is naar diezelfde supermarkt om daar het fruit en de groenten te bezorgen, dat jij morgen gaat aanschaffen. Dat alles telt op tot een persoonlijk verbruik van ruim 100.000 kCal per dag.

Per persoon per dag 100.000 kCal. Dat is een getal om even bij stil te staan. De moderne mens verbruikt 20 keer meer energie dan nodig is om het eigen lichaam draaiende te houden.¹ Met andere woorden: zou ons energiesysteem gebaseerd zijn op menselijke spierkracht, dan zou ieder van ons 24 uur per dag moeten beschikken over 20 zich in het zweet werkende atleten. Op basis van een 8-urige werkdag, is dat voor ieder van ons een legertje van 60 beroepsatleten. Gelukkig

hoeft geen van ons 60 hongerige atleten te voeden. In plaats daarvan voeden we gezamenlijk een arsenaal aan kolenvergassers, gasturbines en verbrandingsmotoren. We voeden deze apparaten niet met voedsel, maar met fossiele brandstoffen. In olie uitgedrukt, vertaalt zich dit naar één jerrycan van tien liter olie per persoon per dag. En die dagelijkse jerrycan, die compacte bundeling van 100.000 kCal, kost ons minder dan vijf euro. Voor dat bedrag, kun je beslist geen 60 monden voeren.

Olie is een energiedrager die wat betreft gebruiksgemak en kosten onverslaanbaar is. Ik heb 27 jaar lang mijn bescheiden steentje bijgedragen aan het beschikbaar maken en betaalbaar houden van onze dagelijkse jerrycan olie. Daar ben ik trots op. In die 27 jaar is de wereldbevolking met 43% toegenomen, maar dat heeft ons er niet van weerhouden om een almaar groter deel van de wereldpopulatie toegang te geven tot die dagelijkse jerrycan. Over die 27 jaar vertaalt zich dat naar een 62% toename in de wereldwijde olie- en gasproductie.

Het zou prachtig zijn als we de groei in dit productieproces konden voortzetten, zodat we een almaar groter deel van de wereldbevolking hun dagelijkse jerrycan kunnen geven. Maar we weten allemaal dat er een keerzijde kleeft aan een energiesysteem gebaseerd op fossiele energie. Ik ben geen klimaatwetenschapper, maar als natuurkundige wil ik wel iets kwijt over de fysica en de subtiliteit van de opwarming van de aarde door broeikasgassen.

¹ We vergelijken hier het per-capita primaire energie verbruik (gewonnen energie vóór omzetting naar andere energievormen) met de per-capita primaire energie-inhoud van onze voedselvoorziening (verbouwde gewassen ongeacht of deze direct genuttigd worden door mensen, danwel door vee). Diezelfde factor 20 vinden we door het in het Westen per-capita aangewende elektrische en mechanische vermogen te vergelijken met het vermogen dat door een gezond mens over langere duur geleverd kan worden.

Kosmisch kampvuur

De aarde bevindt zich in een koud heelal in de directe nabijheid van een hete ster, genaamd 'zon'. Deze situatie is fysisch gezien vergelijkbaar met een kampeerder die zich 's nachts warmt aan een kampvuur. Sinds het baanbrekende werk van ondermeer de natuurkundige Ludwig Boltzmann ruim 130 jaar geleden, weten we exact hoe de uitwisseling van warmtestraling in deze situatie resulteert in een thermodynamisch evenwicht. De kosmische kampeerder, aarde, neemt daarbij een temperatuur aan die hoger is dan de temperatuur van het heelal, maar duidelijk lager dan de temperatuur van de zon. Maar er is een extra effect. Als een kampeerder een deken omslaat, en daardoor minder warmte uitstraalt, maar nog wel de warmtestraling van het kampvuur blijft ontvangen, dan zal deze kampeerder het merkbaar warmer krijgen. De kosmische kampeerder doet dit middels een deken genaamd 'atmosfeer'. Deze deken gedraagt zich als een éénrichtingsdeken en dit levert een behoorlijk effectieve verwarming op. Alhoewel de atmosfeer in relatie tot de aarde een flinterdunne deken vertegenwoordigt, zorgt deze deken ervoor dat het temperatuurcontrast met het koude heelal zo'n 10% groter is, dan zonder atmosferische deken.

Nu zijn we de samenstelling van deze deken op subtiele wijze aan het veranderen. Dit leidt tot een meer isolerende deken en dus een warmere aarde. De oorzaak is onze CO₂-uitstoot, voor een groot deel als gevolg van het verbranden van fossiele brandstof. Een significante fractie van de CO₂ die we uitstoten, zal vele millennia in de atmosfeer blijven.² Het toegenomen isolerend vermogen van de deken heeft dus een semi-permanent karakter en geeft een zeer langetermijneffect op het klimaat.

We nemen waar dat de aarde de laatste honderd jaar merkbaar opgewarmd is. Het temperatuurcontrast tussen de aarde en het koude heelal is over die periode toegenomen met ruim 0,3%. En dit temperatuurverschil neemt verder toe. Onderzoek laat zien dat we voldoende fossiele voorraden hebben om het temperatuurverschil tussen aarde en heelal in totaal met 2% te laten toenemen.² Zoals gezegd, een dergelijke temperatuurstijging blijft millennia bestaan. Een temperatuurstijging van 2% over dat soort lange tijdschalen, veroorzaakt een stijging van 1% van het

² Clark *et al.*, "Consequences of twenty-first-century policy for multi-millennial climate and sea-level change", *Nature Climate Change*, 6(4), 360-369 (2016).

watervolume in de oceanen.² Als we dit uitputtend gebruik van fossiele voorraden als een *worst case scenario* zien, lijkt het allemaal wel mee te vallen. Een temperatuurstijging van 2% en zeespiegel stijging van 1%, dat zijn geringe percentages. Op globale schaal gaat het dus om subtiele effecten.

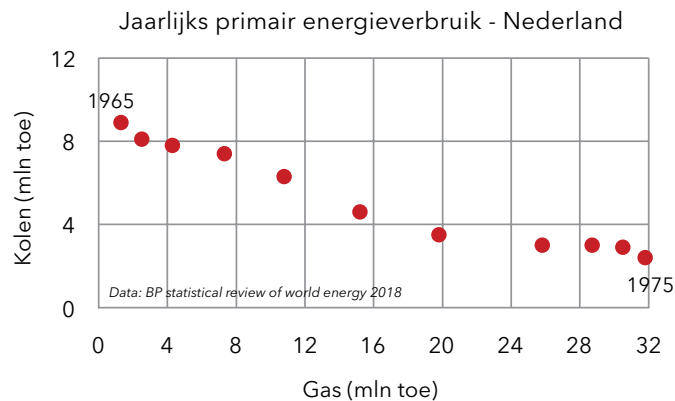
Daar staat tegenover dat onze samenleving een zeer delicaat systeem vormt dat extreem gevoelig is voor subtiele veranderingen op globale schaal. Een duidelijk voorbeeld geven de Deltawerken. Deze beschermen de Nederlandse samenleving tegen overstromingen, maar zijn berekend op niet meer dan een 0,01% zeespiegelstijging.³ Met grote nauwkeurigheid nemen we nu al waar dat de zeespiegel globaal aan het stijgen is en het staat inmiddels vast dat we de komende decennia vele miljarden zullen gaan besteden om dat getal van 0,01% op te krikken naar hogere waarden. Maar bescherming tegen een zeespiegelstijging van een volle 1% gaan we niet realiseren. Ter referentie: 1% stijging van het watervolume in de oceanen correspondeert met een zeespiegel stijging van 40 m. Dat is even schrikken.

Ik wil hierbij niet alarmistisch overkomen. Laat ik dus nogmaals benadrukken dat het hier een scenario betreft van ongebreidelde fossiele consumptie. In Parijs hebben we drie jaar geleden afgesproken dat we dat pad niet gaan volgen. Maar welk pad gaan we wél volgen? Hoeveel CO₂ gaan we nog uitstoten? De cumulatieve hoeveelheid uitgestoten CO₂ zal bepalend zijn voor de zeespiegelstijging op lange termijn, en dus voor de houdbaarheidsdatum van Nederland en andere kustdelta's.

³ Kuipers Munneke, "De vraag is niet óf Nederland onder water verdwijnt, maar wannéér", NRC Opinie, 11 juli 2018.

Climbing mount fossil

In Nederland weten we hoe een succesvolle energietransitie eruit ziet. In 1959 werd in Groningen gas ontdekt, en korte tijd later (in 1963) werd het eerste gas gewonnen. Wat volgde, was een nationale energietransitie waarbij kolen vervangen werden door Gronings gas. Miljoenen huishoudens maakten in korte tijd massaal de overstap. We kunnen het pad dat daarbij bewandeld werd, weergeven in een diagram (zie figuur 1). Ieder jaar plaatsen we een punt in dit diagram. De verticale positie van dat punt correspondeert met het kolenverbruik in dat jaar en de horizontale positie met het gasverbruik in datzelfde jaar. Om appels met appels te vergelijken, zorgen we ervoor dat beide verbruiken gemeten worden in dezelfde eenheden.



Figuur 1. Het pad dat Nederland een halve eeuw geleden volgde bij de transitie van kolen naar gas.

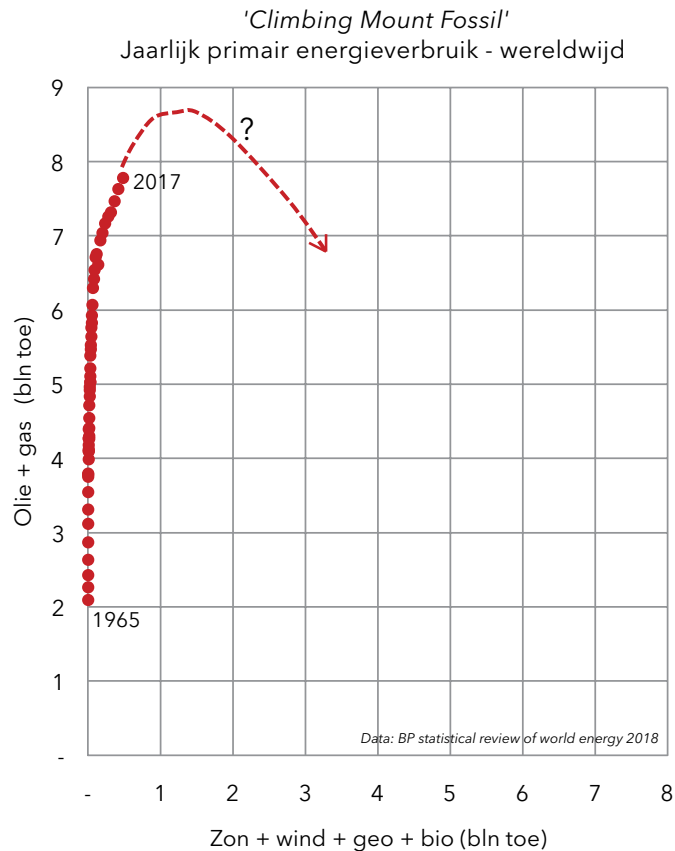
Het pad van de transitie begint linksboven (veel kolen en weinig gas) en loopt via een helling naar rechtsonder (veel gas en weinig kolen). Het beeld van een glijbaan doemt op. Dit beeld is het kenmerk van een perfect uitgevoerde energietransitie. Wat verder opvalt, is dat het uiteindelijke gasverbruik veel hoger lag dan het oorspronkelijke kolenverbruik. Dit heeft te maken met welvaartsgroei en verhoogd energieverbruik (bijvoorbeeld door de opmars van centrale verwarming), maar vooral ook door het feit dat het Groningse gas niet alleen een vervanger werd voor kolengestookte verwarming, maar ook voor veel oliestook.

In die tijd was oliestook, met name voor de nieuwere woningen, niet ongebruikelijk. Voor mijzelf is een van mijn vroegste jeugdherinnering die van 'de olieman'. Het moet 1964 geweest zijn, ik was drie jaar en erg onder de indruk - en zelfs een beetje bang - van de reusachtige, in een zwart lederen jas gehulde man, die met regelmaat aan de deur betaald werd. De olietank in de achtertuin herinner ik mij ook nog: een olievat dat horizontaal gekanteld rustte op een simpele stellage. Ik weet dat het 1964 geweest moet zijn, omdat mijn vader in dat jaar zijn baan bij de Staatsmijnen gedag had gezegd en ons gezin verhuisde van Zuid-Limburg naar West-Brabant. Kort nadat we de woning in Brabant betrokken, maakte onze wijk de overstap naar gas en verdween de olietank uit de achtertuin. Acht jaar later werd de laatste kolenmijn in Limburg gesloten.

We zien deze transitie snelheid terug in het kolen-en-gas-plaatje. Het kolenverbruik werd in vijf jaarlijkse stappen (1965 - 1970) gehalveerd en in de vijf jaar daarna (1970 - 1975) wederom gehalveerd. De gehele transitie voltrok zich binnen tien jaar. De overstap van kolen naar gas was aantrekkelijk voor Nederlandse huishoudens en werd gestimuleerd door de overheid. Overigens is het zo dat in latere jaren (in reactie op de energiecrisis van 1973) het kolenverbruik in Nederland weer groeide, maar dat is een ander verhaal en het doet geen afbreuk aan het feit dat een energietransitie zich snel kan voltrekken als het een overstap betekent naar een voor consumenten aantrekkelijk energiesysteem.

We verleggen nu onze aandacht naar de huidige wereldwijde energietransitie (zie figuur 2). Dit betreft een transitie van fossiele energie naar duurzame energie. We maken weer een plaatje van het pad dat we daarbij bewandelen. We markeren verticaal de jaarlijkse hoeveelheden energie verkregen uit olie en gas en horizontaal de jaarlijkse energie gewonnen uit duurzame bronnen zoals zon, wind, geothermie en biobrandstoffen. We gebruiken voor beide assen weer dezelfde eenheden.

Eén ding valt direct op. We glijden in dit plaatje niet van fossiel (linksboven) naar duurzaam (rechtsonder). We beklimmen nog altijd 'mount fossil'. Zorgwekkend is allereerst de steilheid waarmee we naar boven bewegen, een indicatie dat de groei in olie en gas nog altijd groter is dan de groei in duurzaam. Maar wat nog meer zorgen zou moeten baren, is dat we vooralsnog geen tekenen zien dat ons pad naar rechts begint te buigen. We hebben de top van *mount fossil* duidelijk nog niet bereikt en we moeten concluderen dat ondanks alle inspanningen wereldwijd, de feitelijke energietransitie (de glijvlucht omlaag) nog niet begonnen is.



Figuur 2. *Climbing mount fossil*: een wereldwijde transitie van fossiel naar duurzaam, vereist dat we een pad omlaag gaan inslaan.

Afroepbaar, schaalbaar en duurzaam

Waarom boeken we zo weinig vooruitgang? Waarom gaat de huidige energietransitie zoveel langzamer dan de transitie 50 jaar geleden van kolen naar gas? Wordt dit veroorzaakt door onwillige politici? Zaaient klimaatsceptici teveel twijfel? Is de olie- en gaslobby de schuldige?

Hoezeer we ook de vinger zouden willen wijzen naar anderen, de echte oorzaak ligt bij onze eigen keuzes. Feit is dat fossiele brandstoffen voor de gebruiker enorm aantrekkelijk blijven. Ik noemde eerder de persoonlijke dagelijkse jerrycan olie die minder dan vijf euro kost, die 100.000 kCal bevat en die een legertje van 60 beroepsatleten vervangt. Het is simpelweg nog niet mogelijk om duurzame energie voor consumenten even aantrekkelijk te maken.

Dit lag anders bij de vervanging van kolen door gas. De nieuwe vorm van energie - gas - was voor gebruikers aantrekkelijker dan kolen. Gas vereist geen voorraadbeheer, je krijgt er geen vuile handen van en je hoeft geen as te scheppen. Gas is beschikbaar wanneer nodig, maar blijft bescheiden uit het zicht en levert geen zorgen op. En niet onbelangrijk: gas is net zo goedkoop als kolen. De transitie van kolen naar gas ging snel, omdat gas voor de gebruiker een aantrekkelijk alternatief was. De overheid speelde een faciliterende rol door het stimuleren en beschikbaar maken van gasinfrastructuur, maar de marktvraag was uiteindelijk sturend. Wat dit betreft, was de transitie van kolen naar gas zoals de transitie van mobiele telefoons naar smartphones. Een beter product heeft geen subsidies of andere stimuleringsmaatregelen nodig. Een beter product verkoopt zichzelf.

Wat een betere energietechnologie is, werd altijd bepaald door twee factoren: schaalbaarheid en afroepbaarheid. Nu komt daar de eis van duurzaamheid bij. Een energietechnologie scoort op schaalbaarheid wanneer het tegen een betaalbare prijs een significante bijdrage kan leveren aan de wereldenergiebehoefte. En het scoort op afroepbaarheid als het 24 uur per dag en alle maanden van het jaar, daar waar nodig, beschikbaar gemaakt kan worden. Als we voor minder dan vijf euro per jerrycan CO₂-neutrale en gemakkelijk transporteerbare brandstof konden maken, dan gleden we nu comfortabel langs de flanken van *mount fossil* omlaag naar een CO₂-vrij energiesysteem. Met andere woorden: als we een duurzame energietechnologie hadden die scoorde op schaalbaarheid en afroepbaarheid,

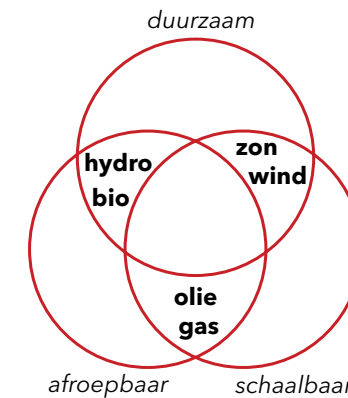
dan was de energietransitie in volle gang geweest. Helaas, dit is niet het geval. We hebben *niet* de beschikking over een duurzame energietechnologie die qua afroepbaarheid en schaalbaarheid de competitie aan kan met olie.

Ik noem twee voorbeelden ter illustratie. Allereerst biobrandstof. Biobrandstof wordt in Brazilië op grote schaal commercieel aangeboden, maar deze vorm van energie is niet globaal schaalbaar. Dit volgt uit het eerder genoemde feit dat ons energiesysteem 20 keer groter is dan ons voedselsysteem. Omdat de energieopbrengst van gewassen die biomassa genereren, per vierkante meter niet wezenlijk hoger is dan de energieopbrengst van gewassen die ons voedsel leveren, legt bio-energie een onevenredig grote claim op vruchtbare grond. Dit betekent niet dat biomassa in de toekomst geen enkele rol zal spelen in ons energiesysteem, maar zonder opzienbarende doorbraken in bio-energietechnologie zal deze rol marginaal blijven.

Een ander voorbeeld is zonne-energie. Met fotovoltaïsche panelen kan zonlicht omgezet worden naar elektrische energie. Met de nu beschikbare zonnepanelen is die omzetting al behoorlijk efficiënt. In vergelijking met het fotosynthesep proces (de omzetting van zonlicht naar biomassa) is de omzetting van zonlicht naar elektrische energie vele malen efficiënter. De precieze getallen hangen af van het type planten en het type zonnecellen dat gebruikt wordt in de vergelijking, maar als vuistregel kunnen we stellen dat de omzetting van licht naar elektriciteit zo'n 40 keer efficiënter is dan de omzetting van licht naar biomassa. Dit maakt een dusdanig groot verschil dat we zonne-energie als schaalbaar kunnen classificeren. De afroepbaarheid is echter een ander verhaal. Dit hoeft ik u niet uit te leggen: we weten allemaal dat zowel de dag-nacht-cycli als de seizoenscycli variabiliteitsproblemen genereren voor fotovoltaïsche technologie.

Als we diverse energietechnologieën op die manier onder de loep nemen en beoordelen op de drie genoemde criteria, dan levert dat het plaatje in figuur 3 op.

De uitdaging is nu om energie technologie te creëren die we kunnen plaatsen in het centrum van het plaatje. Energie technologie die voldoet aan de drie genoemde eisen. Daarbij gaat veel aandacht uit naar energieopslag. De term 'batterijen' in de titel van deze introerede refereert hieraan. Daarbij moeten we de term 'batterijen' ruim interpreteren: iedere vorm van schaalbare energieopslag die gekoppeld kan worden aan duurzame energieopwekking (bijvoorbeeld zonne-energie en windenergie) zou invulling geven aan het centrale deel van het



Figuur 3. Nieuwe technologie in het centrum van dit diagram is een noodzaak voor een succesvolle energietransitie.

plaatje. Daarbij is aan ideeën geen gebrek. De grote vraag is hoe die ideeën snel en effectief te onderzoeken op haalbaarheid, en vervolgens de haalbare ideeën om te zetten naar schaalbare componenten in ons energiesysteem.

CCER

Samenvattend zien we enerzijds een alarmerend beeld van een langdurige klimaatverandering die millennia zal voortduren en die gepaard zal gaan met onomkeerbare globale zeespiegel stijgingen. Anderzijds zien we dat we grote moeite hebben om de oorzaak van deze klimaatverandering weg te nemen: het lukt ons niet om onze energie-gerelateerde CO₂-uitstoot terug te dringen. Maar we begrijpen ook dat een doorbraak op het gebied van energietechnologie deze impasse kan doorbreken. Dit, dames en heren, is de motivering voor een wereldwijd sterk toegenomen wetenschappelijke en technologische activiteit op het gebied van duurzame energie. De oprichting van het *Center for Computational Energy Research* (CCER) anderhalf jaar geleden, past in dit plaatje. Het CCER is een samenwerking tussen TU/e en instituut DIFFER, waarbij vanuit de TU/e de faculteit Technische Natuurkunde de kartrekker is.

Ik bevind me in de bevoorrechte positie om leiding te geven aan het CCER. Dit onderzoekscentrum heeft een unieke insteek. Wij hebben de strategische ambitie om bij te dragen aan het versnellen van de energietransitie. Qua aanpak maken we daarbij intensief gebruik van de rekenkracht van computers. Met computers verrichten we verkennend onderzoek naar oplossingen voor energievraagstukken. Dit representeert het 'bits' en 'bytes' deel in de titel van deze voordracht.

Veel van onze projecten zijn gericht op het voorspellen welke materialen het meest geschikt zijn voor specifieke energietoepassingen. Het gaat vaak om complexe materialen, en de essentiële onderzoeksvragen betreffen vaak de precieze samenstellingen en configuraties op atomair niveau. De samenwerking met experimentatoren is daarbij essentieel. Een gezonde combinatie van experimenteren en rekenen, geeft de beste kansen op verscherpte intuïties en vernieuwende inzichten. Maar voordat ik meer vertel over het type onderzoek waarop ik de komende jaren wil gaan inzetten, verduidelijk ik eerst een fundamenteel punt betreffende de rol van computers in de natuurkunde.

Van spelregels naar spelwijzen

Materialen bestaan uit atomen en als je materiaalgedrag wilt begrijpen, zul je het gedrag van atomen moeten begrijpen. Een atoom kun je beschouwen als een wolk van elektronen. Diep binnenin zo'n elektronenwolk zit een atoomkern, maar behalve dat deze kern het atoom massa geeft, is deze voor de bepaling van de materiaaleigenschappen volstrekt onbelangrijk. Het is de dans van de elektronen in de omhullende wolk die bepaalt in welke mate, en hoe, atomen samenklonteren tot moleculen en materialen. Het gedrag en de functionaliteit van alle door mensen vervaardigde producten, ongeacht hoe complex of hoe vernuftig, is daarmee terug te leiden tot een dans van elektronen. Het maakt niet uit of het een anti-aanbakpan, een batterij, een computerchip of een zonnecel is. De natuurkundige wetten die het gedrag en de functionaliteit van al deze items beschrijven, zijn de wetten die de dans van elektronen beschrijven. Dit zijn de wetten van de kwantummechanica, die we inmiddels 90 jaar kennen.

Je zou je daarom kunnen afvragen waarom bijvoorbeeld de anti-aanbakpan niet al 90 jaar geleden bedacht is. De uitdaging hier is het vinden van een materiaal dat tegen hitte kan en dat een zeer geringe wrijving geeft met andere materialen. Maar als je de natuurwetten kent die de dans van elektronen en daarmee de gedragingen van alle materialen beschrijven, dan reken je toch gewoon uit welk materiaal het meest geschikt is?

Het misverstand hier is tweeledig. Allereerst, alhoewel het inderdaad zo is dat de wetten van de kwantummechanica je in staat stellen om bijvoorbeeld de wrijving tussen gegeven materialen te voorspellen, is het niet zo dat je dit zomaar kan omdraaien en op basis van een gewenste wrijving direct kan voorspellen welke combinaties van materialen een dergelijke wrijving zullen opleveren. Als je een geschikt materiaal voor een anti-aanbak laag wilt vinden, moet je vele combinaties van materialen één voor één doorrekenen en voorspellingen doen voor de wrijving die zich voor zal doen. Pas na afloop van al deze berekeningen kun je bepalen welk materiaal het meest geschikt is als anti-aanbak laag.

Dat lijkt op zich nog niet zo erg: je rekent geduldig een redelijk aantal combinaties door totdat je een geschikt anti-aanbakmateriaal gevonden hebt. Maar er is een tweede, meer fundamenteel probleem. Iedere afzonderlijke berekening voor een

gegeven combinatie van materialen is op zichzelf al te groot voor zelfs de meest krachtige computer. De wetten van de kwantummechanica zijn uiterst elegant maar ook uiterst rekenintensief. Dit heeft alles te maken met het feit dat de kwantummechanica, in tegenstelling tot de wetten van de klassieke mechanica, gebaseerd zijn op een beschrijving in termen van kansen. In de klassieke mechanica kun je een voorspelling doen op basis van één specifieke configuratie van deeltjes. Bij het kwantummechanisch doorrekenen van de dans van elektronen daarentegen, ben je gedwongen alle configuraties mee te nemen die een kans hebben om zich voor te doen. Dit geeft aanleiding tot een explosie van het benodigde rekenwerk. Stel bijvoorbeeld dat in een gegeven situatie 100 configuraties beschikbaar zijn voor één enkel elektron. Dan kunnen twee elektronen zich in 100×100 configuraties bevinden. En drie elektronen leveren al $100 \times 100 \times 100$ configuraties op. Deze exponentiële groei maakt het volstrekt onmogelijk om problemen met meer dan enkele elektronen door te rekenen. In werkelijkheid bevat zelfs een microscopisch stukje anti-aanbak laag al miljarden elektronen.

We hebben hier te maken met een situatie die enigszins te vergelijken is met de uitdaging van bordspelen. Het feit dat je de regels van het schaakspel kent, maakt niet dat je je tegenstander kan verslaan. Ook in de natuurkunde is het kennen van de spelregels, in dit geval de wetten van de kwantummechanica, volstrekt onvoldoende om de natuur te verslaan in het ontwikkelen van bijvoorbeeld een perfecte anti-aanbak laag. Iets wat versimpeld: daar waar de theoretische fysica ons de spelregels leert, leert de computationele fysica ons om het spel te gaan spelen.

Lange tijd werd computationele fysica op één hoop gegooid met theoretische fysica. Zo ben ik aan deze universiteit gepromoveerd op een computationeel kwantumfysisch onderwerp bij wat toen de vakgroep theoretische natuurkunde heette. De experimentatoren uit Amsterdam waar ik mee samenwerkte, duiden mij indertijd aan als een theoretisch fysicus. Dat is niet per se een compliment. Experimentele fysici kunnen je uitleggen, gelardeerd met kleurrijke voorbeelden, dat de aanduiding 'theoretisch fysicus' niets anders is dan een eufemisme voor 'mislukt experimentator'. En een theoretisch fysicus zal desgevraagd computationele fysici classificeren als mislukte theoretici. Daarmee is een computationeel fysicus mislukt als mislukking. En een dubbele ontkenning geeft in dit geval geen bevestiging. Zo bezien staat een computationeel fysicus eenzaam onderaan de pikorde van fysici.

Mislukt mislukking of niet: ik ben een computationeel fysicus en geen theoretisch fysicus. Immers: ik stop niet bij de spelregels, maar probeer het spel te spelen. En daarbij ga ik een zet of een speelwijze die nieuw – en wellicht riskant – is, niet uit de weg. Dat geldt ook voor het CCER. Het spel dat wij ons eigen maken, is het spel dat ten doel heeft de natuur te verslaan in het vinden van materialen en processen die ons gaan helpen bij de transitie naar duurzame energie. De natuur is daarbij een formidabele tegenstander.

Bits en bytes inzetten om betere materialen te ontdekken, is een mooi streven, maar alles bij elkaar genomen, lijkt deze taak tamelijk hopeloos. We kennen de spelregels waaraan de dans van de elektronen voldoet, maar we missen de rekenkracht om de juiste speelwijze te bepalen. Er is echter hoop. Allereerst hoeven we het spel niet perfect te spelen. Het helpt al als we redelijke speelwijzen vinden. Met andere woorden: als we de dans van de elektronen in een voldoende nauwkeurige benadering kunnen uitrekenen, dan komen we al een heel eind in het voorspellen van materiaaleigenschappen. Eind jaren 80 van de vorige eeuw, zo'n 60 jaar nadat de 'spelregels' van de kwantummechanica ontdekt werden, resulteerden benaderende aanpakken in werkbare algoritmes. Het werd mogelijk om de dans van elektronen met enige nauwkeurigheid door te rekenen, ook als het problemen betrof met meer dan enkele elektronen. Het leverde rekenpioniers Walter Kohn en John Pople de Nobelprijs op in 1998. Sindsdien heeft het vakgebied, door de alsmaar toenemende computerkracht en ook door verbeterde methoden, verdere vooruitgang geboekt. Een tweede doorbraak werd gerealiseerd door combinaties van kwantum en klassieke methodes. Dit leidde 15 jaar later wederom tot een Nobelprijs.

De tijd lijkt nu rijp voor een volgende doorbraak.

In de voetsporen van Van der Waals

We zagen dat de kwantummechanica ons de wetten geeft waarmee de dans van elektronen wordt vastgelegd. We zagen ook dat het rigoureuus doorrekenen van deze dans ons voor enorme opgaves stelt, maar dat na vele decennia computationeel onderzoek benaderende methoden bruikbare resultaten beginnen op te leveren. Een volgende doorbraak lijkt mogelijk als we het kwantumprobleem van de dansende elektronen volledig kunnen vertalen naar een klassieke beschrijving in termen van wisselwerkende atomen.

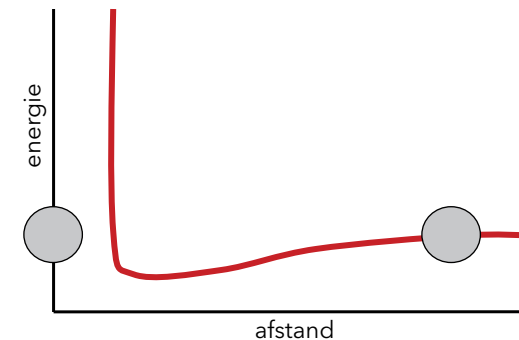
Het idee dat je het gedrag van materie kan terugvoeren op de wisselwerkingen tussen atomen gaat terug naar de Nederlandse fysicus Johannes van der Waals. Van der Waals is niet bekend bij het grotere publiek, maar is onbetwist een van de giganten die de Nederlandse natuurkunde heeft voortgebracht. Hij is een van de tien Nederlandse Nobelprijswinnaars in de natuurkunde en de eerste van de slechts drie Nederlanders die een ongedeelde Nobelprijs voor natuurkunde in ontvangst mocht nemen. De natuurkundige studievereniging aan deze universiteit draagt dan ook trots de naam Van der Waals.

De biografie van Johannes van der Waals leest als een filmscript. Johannes werd in 1837 geboren in Leiden als zoon van een timmerman. In die tijd betekende een dergelijke komaf dat de mulo, een voorloper van het huidige vmbo-t onderwijs, voor Johannes het hoogst haalbare was. Johannes moet een uitstekende scholier geweest zijn, hij voltooide de mulo op 15-jarige leeftijd en ging meteen aan de slag als hulponderwijzer op een basisschool. Johannes studeerde in de avonden verder en werd onderwijzer en vervolgens hoofdonderwijzer. Zijn interesse in natuurkunde maakte dat hij ook college begon te volgen aan de universiteit van Leiden. Echter, omdat hij niet geschoold was in de klassieke talen, werd hij niet toegelaten tot de officiële examens. Het was hem wel toegestaan om onderwijs-certificaten te behalen. Zo lukte het hem uiteindelijk leraar te worden aan een hbs, een type middelbare school dat voor hemzelf indertijd ontoegankelijk was.

Korte tijd later veranderde de onderwijswet. De minister van onderwijs kreeg de bevoegdheid om in speciale gevallen studenten die niet aan alle formele eisen van vooropleiding voldeden toch toegang te geven tot de universiteit. Van der Waals verkreeg als een van de eersten deze ministeriële uitzondering. Hij studeerde ver-

der naast zijn werk als leraar en behaalde vlot zijn doctoraal natuurkunde. Slechts twee jaar na zijn afstuderen, in 1873, promoveerde hij vervolgens op een proefschrift met de titel *Over de Continuïteit van den Gas- en Vloeistofoestand*. Het is dit proefschrift dat hem uiteindelijk de Nobelprijs voor natuurkunde opleverde.

Van der Waals schreef dit proefschrift in een tijd dat men niet sprak over *atomen*, maar over *de atomaire hypothese*. Desalniettemin beschouwde hij in zijn proefschrift het idee dat vloeistoffen en gassen bestaan uit deeltjes van eindige afmeting die elkaar aantrekken. Hij liet zien dat dit idee aanleiding geeft tot een vloeistof-gas overgang en tot een kritieke temperatuur waarboven een dergelijke overgang niet optreedt. Deze resultaten maakten korte metten met het toen heersende idee dat de vloeistof- en gasfases chemisch verschillend zouden zijn. En het gaf de mogelijkheid om de afmetingen en interactiesterktes van de gasdeeltjes te bepalen.



Figuur 4. Het beeld dat Van der Waals introduceerde voor de interactie tussen twee gasdeeltjes, kan weergegeven worden in de vorm van een energie, die afhangt van de configuratie (de onderlinge afstand) van deze deeltjes.

Het door Van der Waals voorgestelde concept toegepast op atomaire gassen, kan gerepresenteerd worden door een interatomaire energie, die afhangt van de onderlinge afstand tussen twee atomen. Het diagram hierboven geeft het kwalitatieve gedrag weer: op korte afstanden heerst een 'harde muur' die voorkomt dat atomen overlappen, terwijl op grotere afstanden de atomen elkaar juist aantrekken (weergegeven door een interatomaire energie die afneemt als de afstand tussen de atomen afneemt).

Dit is een grof model. We zijn nu zo'n anderhalve eeuw verder en we weten dat interatomaire energieën een direct gevolg zijn van de dans van de betrokken

elektronen. We kennen de wetten die de dans bepalen en we kunnen deze dans voor een gering aantal elektronen ook doorrekenen. Dit opent geheel nieuwe mogelijkheden: we kunnen in principe de dans van de elektronen vertalen naar een beschrijving van de interatomaire energie, uitgedrukt in termen van de configuratie van atomen. Als dit lukt, dan hebben we het kwantummechanische (probabilistisch) probleem dat - zoals we zagen - een rekenexplosie veroorzaakt, vervangen door een klassiek (deterministisch) probleem dat niet gehinderd wordt door zo'n rekenexplosie.

Wat we nodig hebben, is een efficiënte manier om interatomaire energieën toe te kennen aan patronen van atomen. Sinds enkele jaren dient zich zo'n manier aan: *machine learning*.

Vermenigvuldigers en ventielen

Wat is *machine learning*? *Machine learning* is de motor achter artificiële intelligentie: een collectie rekenmethodes die maakt dat we een computer kunnen programmeren door het aanbieden van 'ervaringen'. We hebben het hier over methodes zoals *deep learning*; de *machine learning*-techniek die momenteel een ware hype doormaakt.

Ik ga u een geheim verklappen. Ik ga u in enkele minuten de essentie van *deep learning* uitleggen. En ieder van u zal het met mij eens zijn dat deze *machine learning*-aanpak kinderlijke eenvoudig is. De essentie van de methode kan weergegeven worden door eenvoudige diagrammen: alles kan uitgelegd worden zonder een enkele wiskundige vergelijking op te schrijven.

Deep learning maakt gebruik van rekennetwerken (vaak aangeduid als neurale netten) die opgebouwd zijn uit niet meer dan twee afzonderlijke bouwstenen. Ik duid deze bouwstenen aan als 'vermenigvuldigers' en 'ventielen'. Een vermenigvuldiger wordt in een diagram weergegeven door een recht lijnstuk en een ventiel door een golvend lijntje. Zowel vermenigvuldigers als ventielen hebben twee uiteinden: een ingang met een ingangswaarde en een uitgang, met een uitgangswaarde. Verder is een getal geassocieerd met iedere vermenigvuldiger. Dat getal geeft de factor aan waarmee vermenigvuldigd wordt: de vaste verhouding tussen de uitgangswaarde en de ingangswaarde. Voor een ventiel geldt dat als we een getal aanbieden aan de ingang, dan komt bij de uitgang datzelfde getal tevoorschijn, tenzij de ingangswaarde negatief is. In dat geval krijgt de uitgang de waarde nul.

Behalve vermenigvuldigers en ventielen hebben we ook een regel nodig voor het combineren van deze bouwstenen. Ook dat is simpel. De eindpunten van vermenigvuldigers en ventielen kunnen onbeperkt aan elkaar geknoopt worden. Op knooppunten worden de waardes van alle bijeenkomende uitgangen bij elkaar opgeteld. De resulterende waarde wordt vervolgens doorgegeven aan de ingangen die op dat knooppunt samenkomen. De afspraak hierbij is, dat het koppelen van ingangen aan uitgangen nooit mag resulteren in een gesloten lus van ingang-uitgangkoppelingen. In de diagrammen voorkomen we dit, door voor

ieder element te eisen dat de uitgang in het diagram gepositioneerd moet worden boven de ingang.

Een handige doe-het-zelver zou dit soort netwerken kunnen realiseren op basis van mechanische elementen. In de praktijk doen we dit niet: het is veel efficiënter om deze netwerken virtueel te construeren en digitale computerchips, in plaats van analoge vermenigvuldigers en ventielen, het werk te laten doen.



Figuur 5. Eenvoudige voorbeeldrekennetwerken opgebouwd uit vermenigvuldigers (rechte verbindingen tussen knooppunten) en ventielen (golvende verbindingen). Links een net met drie ingangen en één uitgang, rechts een net met twee ingangen en één uitgang.

Twee zeer eenvoudige voorbeeld netwerken zijn hierboven weergegeven. Links zie je een configuratie die een simpele functie heeft: het bepaalt een gewogen som van invoerwaardes en geeft deze som door als deze positief is. Is de som negatief, dan verschijnt een nul-sigitaal aan de uitgang. Neurologen zullen met hun hoofd schudden, maar veel *machine learning*-onderzoekers menen in deze functionaliteit, die van een zenuwcel of neuron te herkennen. Dit elementaire netwerk wordt daarom ook wel aangeduid als een artificieel neuron.

Het voorbeeld rechts is wellicht interessanter. Het is een voorbeeld van een functioneel rekennet dat opduikt in het nieuwe bachelor's vak *Machine Learning for Physicists*. Dit is een vak voor tweedeaars studenten dat ik met ingang van dit jaar verzorg, en dat overigens ook openstaat voor niet-natuurkundige studenten. De studenten ontdekken via praktische oefeningen dat met een eenvoudige netwerkarchitectuur, zoals die weergegeven rechts in de figuur, de wet van Pythagoras gemodelleerd kan worden. Wordt aan de beide ingangen de lengte van de rechthoekszijden aangeboden, dan verschijnt aan de uitgang een schatting voor de lengte van de hypotenusa. Voor geschikt gekozen waarden van de vier vermenigvuldigers in dit netwerk, zal de nauwkeurigheid van dit resultaat altijd beter zijn dan 1%. Een hogere nauwkeurigheid is mogelijk, maar daarvoor moet een complexer netwerk gebruikt worden.

Een dergelijke opmerking kan altijd gemaakt worden. Met netwerken opgebouwd uit niet meer dan bovenstaande twee elementen, kun je *elk denkbaar verband* tussen ingangen en uitgangen realiseren. Een belangrijke opmerking daarbij is, dat om een gegeven nauwkeurigheid te behalen, het netwerk wel een minimum complexiteit moet bezitten.

Een voorbeeld. Neem het verband tussen configuraties die zich kunnen voordoen bij het bordspel Go en de winstverwachting voor de speler die aan zet is. Dit verband is uiterst complex en voor mensen moeilijk te doorgronden. Het bovenstaande theorema zegt nu, dat als je de winstverwachting met vooraf gespecificeerde nauwkeurigheid wilt verkrijgen voor ieder van de bordconfiguraties, dan bestaat er een kritische complexiteit waarboven rekennetwerken, zoals hierboven beschreven, dit voor jou kunnen realiseren.

Dit alles lijkt wellicht een vrijblijvende en puur theoretische discussie. Recentelijk zijn echter rekennetwerken geconstrueerd die daadwerkelijk de winstverwachting geven voor bordconfiguraties in het spel Go. Deze winstverwachting blijkt verblijvend accuraat: het rekennet verpulvert iedere menselijke tegenstander.⁴ Het blijkt dat de mensheid een spel als schaken redelijk onder de knie heeft, maar dat dit niet geldt voor een spel met meer diepgang, zoals Go. Het zou dan ook geen verbazing moeten wekken dat Go-spelers zich wereldwijd massaal storten op de door het rekennet gespeelde spellen: er is veel van te leren.

⁴ Silver et al, "Mastering the game of Go without human knowledge", Nature, 550, 354-359 (2017).

Project Manhattan

Kunnen wij ook veel gaan leren van rekennetten die voor atomaire configuraties een schatting geven van de interatomaire energie? Zodra een dergelijk rekennet geconstrueerd is, kunnen we de dans van de elektronen vergeten en ons richten op de atomen zelf. Met als resultaat een enorm toegenomen capaciteit voor materiaalsimulaties. Een computationeel fysicus droomt daarbij al snel van een rol voor simulaties in de materiaalkunde, vergelijkbaar met - of zelfs voorbijgaand aan - de rol van simulaties in bijvoorbeeld stromingskunde en weersverwachtingen.

Van bordconfiguraties in het spel Go naar atoomconfiguraties in materialen, is conceptueel geen grote stap. Maar er is veel werk te verzetten voordat een voldoende nauwkeurig rekennet een realiteit zal zijn. De uitdaging ligt voor een belangrijk deel in het vinden van een slim, voor rekennetten geschikte, beschrijving van de atoomconfiguraties.

Dit is slechts één voorbeeld van een beoogde computationele doorbraak die in geval van succes direct ingezet kan worden in de zoektocht naar verbeterde energietechnologieën. Er zijn meer voorbeelden, maar het zou te ver voeren die allemaal te bespreken. Ik wil hier wel een ander punt noemen. Dat betreft een vraag die bij velen van jullie gerezen zal zijn. Terugdenkend aan de urgentie van de energietransitie, kun je de vraag stellen: "Is het niet te laat voor dergelijk fundamenteel computationeel onderzoek?"

Om die vraag te beantwoorden, wil ik teruggaan in de tijd. Terug in de tijd naar een grootschalig wetenschappelijk project dat onder enorme tijdsdruk werd uitgevoerd. Ik heb het hier over het *Manhattan Project*: de ontwikkeling van de atoombom tijdens de tweede wereldoorlog. Kostte wat kost moest voorkomen worden dat de Duitsers eerder dan de geallieerden over een atoombom zouden beschikken. De zoektocht naar het optimale recept voor een betrouwbare bom werd onder enorme tijdsdruk uitgevoerd. En om die zoektocht te versnellen en kansrijker te maken, werd juist toen geïnvesteerd in machinaal rekenen en computationele methoden. Terugkijkend kunnen we stellen dat het *Manhattan Project* niet alleen het tijdperk van atoomenergie, maar ook het tijdperk van computer simulaties inluide.

Nu staan we voor een uitdaging die vergelijkbaar is met de uitdaging waar natuurkundigen voor stonden in het *Manhattan Project*. We zoeken naar duurzame manieren om globaal schaalbare en op afroep beschikbare energie te leveren. Bij dit soort exploratief onderzoek dat onder grote tijdsdruk staat, moeten we alle instrumenten die tot onze beschikking staan, inzetten. Wanneer toekomstige generaties terugkijken op de inspanningen voor de energietransitie aan het begin van de 21e eeuw, stellen zij wellicht vast dat deze niet alleen het post-fossiele tijdperk inluide, maar ook de start van *machine-learned*-wetenschap betekende. Als dat het geval is, mogen we om meer dan één reden trots zijn.

Dankwoord

Ik noemde eerder in deze rede Johannes van der Waals, iemand die niet gehinderd leek door van buitenaf opgelegde barrières. Iemand die bij tegenslag zijn rug rechtte. Ik mag mij gelukkig prijzen dat ik in een tijd en onder omstandigheden opgegroeid ben, waardoor mijn volharding aanzienlijk minder zwaar op de proef gesteld werd. Daarnaast mag ik me gelukkig prijzen dat velen die mijn levenspad kruisten, mij ruimte, kansen, steun, collegialiteit en vriendschap gegeven hebben.

Teruggaand in de tijd, wil ik allereerst mijn collega's van CCER, het Centrum voor Computatoneel Energie Onderzoek, noemen. Beste collega's, het CCER is groeiende en begint golven te veroorzaken in de vijver van het energieonderzoek. Dit is dankzij jullie. Ik kijk ernaar uit samen met jullie de impact van CCER verder te vergroten.

Twee personen uit CCER wil ik met naam noemen: Peter Bobbert en Paul Bezembinder. Peter en Paul; gedrieën geven we de CCER-strategie handen en voeten. Met onze uiteenlopende karakters vormen wij een hecht en divers team, waarbij we elkaar effectief aanvullen. Ik waardeer dit zeer.

De eensgezinde aanpak en visie van twee personen is essentieel geweest voor de vorming van CCER en daarmee tevens voor mijn aanstelling. Ik heb het hier over de decaan van de faculteit Technische Natuurkunde, Gerrit Kroesen, en de directeur van DIFFER, Richard van de Sanden. Gerrit en Richard; ik kijk ernaar uit om samen met jullie de nu al productieve samenwerking tussen TU/e en DIFFER verder uit te bouwen.

Eén persoon heeft een bijzondere rol gespeeld bij het feit dat ik hier vandaag voor u sta. Het betreft een collega hoogleraar die jaren terug al maakte dat ik veel actiever ging nadenken over mijn ambities in het leven. Jom, bedankt voor de *challenge* en de steun.

Deze terugblik zou niet compleet zijn als ik niet mijn vele oud-collega's bij Shell zou noemen. Ik kijk met voldoening terug op 27 fantastische jaren. Boven alles ben ik dankbaar voor de enorme diversiteit aan culturen waarin ik jarenlang ondergedompeld ben geweest. Dat ik een nieuwe weg ingeslagen ben, doet niets af

aan de vriendschap die ik voel voor de vele ex-collega's in Nederland, Schotland, Oman, Texas, Nigeria en India waarmee ik al die jaren met veel plezier samen-gewerkt heb.

Teruggaand naar mijn pre-Shell tijd is daar mijn leermeester, Boudewijn Verhaar. Onder Boudewijns begeleiding heb ik mij kunnen bekwamen in de kwantumfysica en de computationele natuurkunde. Maar belangrijker nog: Boudewijn heeft mij een kritische wetenschapsethiek en een voorliefde voor samenwerking met experimentatoren bijgebracht. Met Boudewijn als academisch vader, is Boudewijns leermeester - Jan de Boer - mijn academisch grootvader. Zo kan ik een directe lijn naar steeds vroegere leermeesters volgen. Via deze unieke lijn beland ik bij mijn wetenschappelijke bet-bet-overgrootvader. En dat is... Johannes van der Waals. Het stemt mij nederig dat ik niet alleen voort mag borduren op Van der Waals' wetenschappelijke erfenis, maar vooral ook dat ik erfgenaam ben van zijn leermeesterschap.

Inmiddels ben ik in mijn jeugd beland. Elvier, Prisca en Luuk, wij worstelen ons ieder op onze eigen manier door het leven, waarbij een zekere gedrevenheid ons niet vreemd is. We hebben in recente jaren afscheid genomen van onze ouders en zijn daardoor juist een hechter collectief geworden. Dat voelt goed. Ik hoop dat we nog vele jaren op 29 december samen zullen zijn.

Zouden mijn ouders nog geleefd hebben, dan was dit voor beiden een bijzondere dag geweest. Zoals voor velen, geldt ook voor mij dat de stappen die ik zet in het leven de voetsporen van mijn ouders niet altijd vermijden. Ik noemde eerder dat mijn vader in 1964, toen in Nederland de transitie van kolen naar gas werd ingezet, zijn baan bij de kolenmijnen verliet. Ruim 50 jaar later, terwijl de wereld begint in te zien dat een transitie van fossiel naar duurzaam noodzakelijk is, verlaat ik de olie-industrie. Ik denk daarbij aan de woorden van Simon Vestdijk: *"Dat de geschiedenis zich herhaalt, is vooral daarom zo leerzaam, omdat zij zich nooit op dezelfde wijze herhaalt."*

Chirley en Kim, ik besluit met jullie. Chirley, ons gezamenlijk avontuur heeft ons de gehele wereld overgebracht en daarnaast zijn we samen 36 keer om de zon gereisd. Het zou 37 keer geweest zijn, ware het niet dat een autobom roet in het eten gooide. Waarmee ik maar wil zeggen dat het gebruik van de term 'gezamenlijk avontuur' geen element van overdrijving bevat. We staan nu ongeveer op de plek waar we elkaar voor het eerst ontmoet hebben. We lijken terug bij af, maar het is

de reis die telt. Jouw steun door dik en dun maakte deze reis mogelijk. Daar ben ik je zeer dankbaar voor. Ik hoop op nog heel wat gezamenlijke rondjes rond de zon.

Kim, je stond al vroeg op eigen benen. Dat gaat je goed af. Op een afstand sla ik als vader nog altijd met trots en genoegen je verrichtingen gade. Je weet tot nu toe de voetstappen van je ouders aardig te vermijden, ik ben benieuwd wat jouw reis je gaat brengen.

Dank voor uw aandacht.

Ik heb gezegd.

Curriculum vitae

Prof.dr.ir. J.M.V.A. (Vianney) Koelman is per 1 maart 2018 benoemd tot deeltijdhoogleraar in het vakgebied Computational Energy Research aan de Faculteit Technische Natuurkunde van de Technische Universiteit Eindhoven.

Vianney Koelman studeerde Technische Natuurkunde aan de Technische Universiteit Eindhoven (1985). Hier promoveerde hij in 1988 op computationeel onderzoek aan quantum gassen. Vervolgens maakte hij de overstap naar corporate research (Royal Dutch Shell). Een internationale carrière in petrofysisch onderzoek en ontwikkeling volgde, waarbij hij diverse leiderschapsposities bekleedde in Europa, Amerika, Azië, en Afrika. In 2010 werd hij benoemd tot Chief Scientist en vervolgens ook tot Vice President Computational Technology. In die rol was hij verantwoordelijk voor het opzetten van Shell's computationeel onderzoekscentrum in Bangalore, India. Dit gaf hem de gelegenheid zijn passie voor innovatie in computersimulaties mede te richten op toekomstige energietechnologie. In 2016 besloot hij zijn carrière te verleggen. Hij keerde terug naar Nederland en accepteerde een gecombineerde aanstelling aan de Technische Universiteit Eindhoven en NWO instituut DIFFER, waarbij hij de leiding heeft over het in 2017 opgerichte Center for Computational Energy Research.

Colofon

Productie

Communicatie Expertise
Centrum TU/e

Fotografie cover

Rob Stork, Eindhoven

Ontwerp

Grefo Prepress,
Eindhoven

Druk

Drukkerij Snep, Eindhoven

ISBN 978-90-386-4697-8
NUR 925

Digitale versie:
www.tue.nl/oraties/

Bezoekadres

Gebouw 1, Auditorium
Groene Loper, Eindhoven

Navigatieadres

De Zaale, Eindhoven

Postadres

Postbus 513
5600 MB Eindhoven
Tel. (040) 247 9111
www.tue.nl/plattegrond

The logo for TU/e, consisting of the letters 'TU/e' in a bold, sans-serif font. The 'e' is lowercase and has a distinctive shape with a horizontal bar that extends to the right.

**EINDHOVEN
UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY**