
CUBE (CUrieus Biosimulation Exercise) 2026 Rulebook

제 1 장. 참가자격

제 1 조 (참가자격의 기본 원칙)

본 대회는 전산생물학·생물정보학 기반 문제 해결 역량을 갖춘 다양한 배경의 참가자를 모집하며, 다음 요건을 충족하는 경우 참가할 수 있다.

제 2 조 (참가 대상)

만 19 세 이상의 국내·외 대학(원)생 또는 일반인으로, 개인 또는 최대 4 인 팀 구성 가능

※ 전공 무관 (관련 분야: 전산생물학, 생물정보학, 생명과학, 화학, 의생명공학, 컴퓨터과학 등)

※ 참가자의 국적·학력·경력 제한 없음

제 3 조 (참가 형식)

- ① 개인 또는 최대 4 인으로 구성된 팀 단위 참가로 한다.
- ② 동일인은 여러 팀에 중복 참여할 수 없다.
- ③ 팀 대표는 결과 제출 및 대회 운영진과의 공식 소통을 담당한다.

제 2 장. 대회 목적

제 1 조 (대회 목적)

본 대회는 실제 생명과학 및 바이오의약 개발 과정에서 마주하는 복잡한 문제를 전산생물학적 접근(Computational Biology)으로 해결하는 능력을 평가하고, 참가자들이 현대 생명과학 특히 제약 연구에 필요한 종합 분석 역량을 갖출 수 있도록 하는 데 목적이 있다.

제 2 조 (세부 목적)

① 실전형 생명과학 문제 해결 능력 평가

단백질 구조, 항체-항원 상호작용, 돌연변이 영향, 질병 관련 타깃 분석 등 실제 제약 연구 현장에서 발생하는 문제를 데이터 기반으로 해결하는 능력을 검증한다.

② 전산생물학 도구의 종합적 활용 역량 평가

구조예측, 도킹, 분자동역학(MD), 서열 분석, 머신러닝 기반 모델 등을 조합하여 논리적·과학적 결론을 도출하는 능력을 평가한다.

③ 창의적 문제 해결 전략 발굴 유도

문제 해결 방식에 제한을 두지 않고 자유로운 접근을 허용함으로써 혁신적인 분석 전략과 창의적 인사이트 발굴을 유도한다.

④ 재현 가능한 과학적 연구 방법론 습득

분석 도구, 데이터, 파라미터, 절차를 명확히 기록하여 연구의 재현성 (Reproducibility)과 투명성 (Transparency)을 확보하는 연구 태도를 함양한다.

⑤ 바이오의약 개발 실무 경험 제공

전산생물학 기반 워크플로우를 직접 수행함으로써 구조생물학·면역학·신약개발 분야의 실무형 분석 과정을 이해하고 경험한다.

제 3 장. 문제 제공

제 1 조 (문제 제공 방식)

주최 측은 참가자가 전산생물학적 분석 능력을 발휘할 수 있도록 다음 요소를 포함한 문제를 제공한다.

① 연구 배경 및 생물학적 중요성

문제의 생명과학적 맥락, 해당 타깃의 기능, 관련 질병 및 응용 분야를 제시한다.

② 분석 데이터 패키지

FASTA 서열, PDB 구조, 리간드 정보(SDF/SMILES), 변이 리스트, 참고 문헌 등 문제 해결에 필요한 자료를 제공한다.

③ 핵심 분석 과제

참가자가 수행해야 하는 주요 분석 과제를 명시하며, 문제 성격에 따라 구조 예측, 도킹, 시뮬레이션, AI 분석 등의 난이도와 범위가 조정될 수 있다.

④ 선택 과제(Optional)

심화 분석, 추가 탐구, 창의적 가설 제시 등 참가자의 능동적 확장을 평가할 수 있는 선택적 문제를 포함할 수 있다.

제 2 조 (문제 유형 예시)

본 대회의 문제 유형은 주제에 따라 다양하게 구성될 수 있으며, 다음과 같은 예시를 포함할 수 있다.

- 돌연변이가 구조 안정성 또는 기능에 미치는 영향 분석
- 리간드-단백질 결합 모드 예측 또는 친화도 비교
- End-to-End 신약개발 워크 플로우 설계
- 특정 단백질/항체 기능 도출 및 특징 규명
- AI 모델 간 예측 결과 및 성능 비교
- MD 시뮬레이션 기반 동역학·작용 메커니즘 탐색
- ADMET 기반 약물성 평가

제 4 장. 제출물 규정

제1조 (결과물 제출 절차)

① 참가자는 지정된 구글폼을 통해 결과물을 제출하여야 한다.

② 제출 항목은 다음과 같다.

- 유의사항 동의서 (제출서류 서식 1)
- 분석 활용 데이터 정보서 (제출서류 서식 2)
- 분석보고서 (PDF) (제출서류 서식 3)
- 분석 결과 데이터 (압축파일) (별도 파일)

③ 파일명은 다음 형식을 따른다

: [팀명(또는 성명)_문서종류] 예시: 흥길동_분석보고서.pdf, 큐브팀_결과데이터.zip

제 2 조 (분석보고서 작성 기준)

① 분석보고서는 PDF로 제출하며, 다음 항목을 포함하여 작성한다.

- 배경 요약
- 사용한 도구 및 분석 파이프라인 설명
- 결과 데이터 정리
- 시각화 자료 (그래프·구조 이미지 등)
- 최종 결론 및 제안사항

② 제출 전에 다음 문서를 필수로 작성·첨부해야 한다.

- 유의사항 동의서
- 분석활용 데이터 정보서 (사용한 데이터·도구·환경 명시)

제 3 조 (결과 데이터 제출 기준)

① 분석 과정에서 생성된 결과 데이터는 압축파일 형태로 제출한다.

② Curieus 플랫폼 (CURIEUS.NET)을 사용한 경우

- 사용한 입력 파일과 생성된 출력 파일 전체를 폴더 구조를 유지한 채 압축하여 제출한다.
- 또는 분석 과정이 확인 가능한 로그 또는 기록을 포함한다.

③ Local 또는 클라우드/외부 환경(Google Colab, 개인 서버 등) 사용 시:

- 각 단계별 입력 파일 및 출력 파일
- 분석에 사용된 스크립트/코드 또는 설정 파일
- 환경 정보 (도구 버전, 파라미터 등)를 단계별로 정리하여 압축파일로 제출한다.

④ 분석은 여러 단계로 구성되므로, 각 단계별 파일 세트(입력 + 출력)를 모두 포함해야 한다. 누락 시 재현성 부족으로 감점될 수 있다.

⑤ 결과 해석에 도움이 되는 추가 자료(이미지, 문서, 표, 동영상 등)는 형식 제한 없이 자유롭게 첨부 가능하다.

⑥ 일반적이지 않은 확장자(.xtc, .gro, .dcd 등) 사용 시, 해당 파일을 열람할 수 있는 도구 또는 확인 방법을 함께 안내해야 한다.

제5장. 도구 사용 규정

제1조 (허용 도구)

① Curieus 플랫폼 (CURIEUS.NET)

- CURIEUS.NET에 업로드된 모든 모델·도구·알고리즘을 자유롭게 사용할 수 있다.
- 구조예측, 항체·항원 분석, 도킹, ADMET, MD 기반 분석 등 플랫폼 내 모든 공개 기능 활용 가능
- 플랫폼 내 모델을 단독 또는 연계하여 활용 가능
- 사용한 모델, 파라미터, 출력 결과는 보고서에 반드시 명시해야 함

② 로컬 분석 환경

참가자는 다음과 같은 로컬 환경에서 분석을 자유롭게 수행할 수 있다.

- 전산생물학 패키지: BioPython, MDAnalysis, PyRosetta, RDKit 등
- 구조 시각화 및 분석 도구: PyMOL, ChimeraX, VMD 등
- 시뮬레이션 및 도킹 도구: GROMACS, OpenMM, AutoDock Vina, HADDOCK 등
- AI 기반 구조 예측 모델: AlphaFold, ColabFold, ESMFold 등 (공개된 표준 모델에 한함)

③ 클라우드·외부 환경

Google Colab, Kaggle Notebook, 개인 GPU 서버 등 라이선스를 준수하는 모든 외부 계산 환경 사용 가능

제 2 조 (허용되지 않는 도구 및 환경)

다음 각 항목에 해당하는 도구·데이터·환경은 사용할 수 없다.

① 비공개·제한 데이터

- 비공개 연구실 데이터, 사내 데이터, 제 3자의 비허가 데이터
- 라이선스 미보유 상용 DB의 무단 사용

② 비정상적 분석 환경

- 물리적으로 불가능한 시뮬레이션 파라미터 (예: 비정상적 온도/압력 조건, force field 조작)
- 의미 없는 노이즈 추가 또는 데이터 변조

③ 자동 생성 도구를 통한 비정상적 결과 제출

- 허위 실험 데이터·허위 구조·허위 그래프 생성 도구 사용
- 존재하지 않는 논문·결과를 인용하는 행위
- “페이퍼 제너레이터”류의 자동 논문 생성 도구 사용

④ 타인의 연구 결과 무단 사용

- 타 팀·타 연구자의 시뮬레이션 결과를 자신의 결과로 제출
 - 출처 미확인 AI 생성 데이터 사용
 - 외부 코드의 출처 표기 없는 도용
-

제 6 장. LLM 활용 규정

제 1 조 (LLM 활용 규정)

ChatGPT 등 생성형 AI(LLM)는 다음의 원칙 아래 제한적으로 활용할 수 있다.

① 허용되는 활용

- 보고서 문장 다듬기, 서술 구조 개선, 문법 교정
- 코드 오류 설명·개념 이해를 위한 보조적 질의
- 해석·요약·배경 설명 등 비계산적 영역

② 금지되는 활용

- 실제 계산 결과(에너지 값, 도킹 점수, 구조 좌표 등)의 생성
- 가짜 실험 데이터·허구 수치·실존하지 않는 논문 생성
- LLM으로 시뮬레이션 결과를 근거 없이 추정하여 제출
- LLM 생성 코드를 기여도 표기 없이 사용

③ 제출물에서의 의무

모든 팀은 LLM 활용 시 다음 내용을 보고서에 명시해야 한다.

- 사용한 LLM 이름 및 버전
- 활용 목적(예: 문장 다듬기 / 코드 디버깅 등)
- 생성형 AI가 작성한 내용과 참가자 자체 분석의 명확한 구분

제 7 장. 금지 사항

제 1 조 (금지 사항)

① 데이터 조작 및 위조

- 제시된 데이터셋을 임의로 조작·삭제·변형하여 부정한 결과 유도
- 실험 데이터 조작(단위 변경 위조, 그래프 왜곡, 통계 조작 등)
- 수작업으로 생성한 그래프나 값을 모델 결과로 위장

② 표절 및 저작권 위반

- 타인의 보고서·논문·블로그·프로젝트 내용 표절
- 저작권 있는 이미지·도표·구조 시각화 자료의 무단 사용
- 논문 그림을 본인 분석 결과로 기재

③ 공정성 및 윤리 위반

- 타 팀 간 결탁, 정보 공유, 공동 작업
- 심사위원·운영진과의 사전 접촉을 통한 부당한 정보·도움 요청
- 다른 참가자의 데이터·결과·아이디어 사전 유출·도용

④ 시스템 조작 및 방해

- 제출 플랫폼에 허위 파일 업로드 또는 제출 후 수정·교체
- 운영진 시스템(서버·포털 등)에 대한 해킹·우회 시도
- 타 참가자의 작업 환경 또는 제출 방해

⑤ 팀 운영 관련 금지사항

- 동일인의 여러 팀 중복 참여
- 프로젝트에 미참여한 제 3 자에게 대리 작업 또는 외주 의뢰

제 8 장. 평가 및 일정

제 1 조 (평가 기준)

평가항목		세부 평가 기준	배점
서면 평가	과학적 타당성 및 정확성	<ul style="list-style-type: none">문제 이해도방법론의 적절성결과의 과학적 신뢰성	30
	재현성 및 투명성	<ul style="list-style-type: none">데이터 및 도구 활용 완성도분석 절차의 명확성	25
	분석 깊이 및 완성도	<ul style="list-style-type: none">필수 과제 수행선택과제 및 심화 분석	20
	창의성	<ul style="list-style-type: none">독창적 접근법 및 인사이트 발굴	10
	결과 시각화 및 전달력	<ul style="list-style-type: none">시각자료의 품질보고서 구성 및 가독성	15

① 과학적 타당성 및 정확성 (30 점)

- 문제 이해도 (10점): 생물학적 배경과 핵심 질문을 정확히 파악했는가?
- 방법론의 적절성 (10점): 선택한 분석 도구와 접근법이 문제 해결에 적합한가?
- 결과의 과학적 신뢰성 (10점): 도출된 결론이 데이터에 기반하여 논리적이고 타당한가?

② 재현성 및 투명성 (25 점)

- 데이터 및 도구 활용 완성도 (15점): 사용한 모든 데이터, 소프트웨어, 버전이 명확히 기록되고 제출되었는가?
- 분석 절차의 명확성 (10점): 워크플로우가 단계별로 상세히 설명되어 제 3자가 재현 가능한가?

③ 분석의 깊이 및 완성도 (20 점)

- 필수 과제 수행 (12점): 요구된 핵심 분석이 모두 수행되었는가?
- 선택 과제 및 심화 분석 (8점): 추가적인 탐구나 확장 분석이 시도되었는가?

④ 창의성 (10 점)

- 독창적 접근법 및 인사이트 발굴 (10점): 새로운 분석 전략이나 도구 조합을 시도하여 의미 있는 가설을 제시했는가?

⑤ 결과 시각화 및 전달력 (15 점)

- 시각자료의 품질 (5점): 그래프, 구조 이미지 등이 명확하고 효과적인가?

- 보고서 구성 및 가독성 (10점): 논리적 흐름과 명확한 문장으로 작성되었는가?

제 2 조 (일정)

- 공고: 2025.12.01
 - 접수 기간: 2025.12.17 ~ 2025.12.31
 - 문제 공개: 2026.01.01
 - 제출 마감: 2026.01.30
 - 심사: 2026.02.01 ~ 2026.02.06
 - 발표: 2026.02.13 (변동 가능)
-

제9장. 시상

제 1 조 (시상)

상격	과제수	상금	상품
대상	1	100만원	CURIEUS 플랫폼 3개월 이용권
최우수상	1	50만원	
우수상	1	30만원	
장려상	2	10만원	
총계	4	200만원	

제10장. 문의

제 1 조 (문의 방법)

- 공식 이메일: curieus@connects.so
- Discord 지원 채널 운영 예정