Les conteneurs : introduction

Martin Souchal 2023 (DIPSO - INRAE)

ComputeOps

Le projet ComputeOps a pour objectif d'étudier les avantages des conteneurs pour les applications de type HPC. Lancé en 2018, le projet est financé par le master project DecaLog de l'IN2P3 dans le cadre du programme de R&D transverse.

Plan

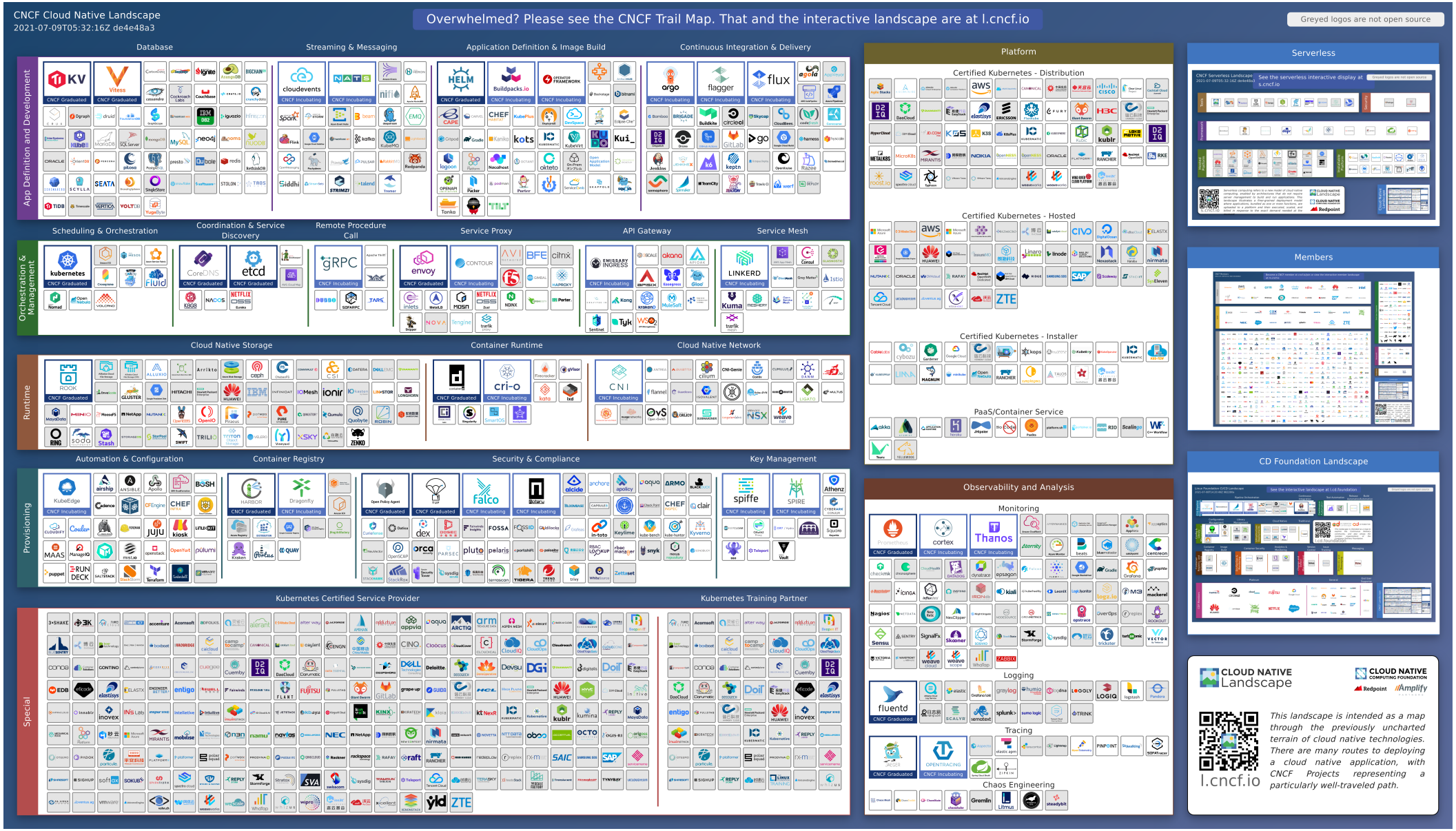
- Les conteneurs : principes généraux
- Les conteneurs et le HPC
- Orchestration et Job Scheduling
- Conclusion

Principe de base

- A l'arrêt, un conteneur est un fichier (ou un ensemble de fichiers) qui est enregistré sur un disque.
- Au démarrage du conteneur, le moteur décompresse les fichiers et les méta-données nécessaires, puis les transmet au noyau Linux, comme un processus normal.
- Un appel API au noyau déclenche une isolation supplémentaire (si nécessaire) et monte une copie des fichiers de l'image du conteneur.
- Une fois lancés, les conteneurs sont un processus Linux comme un autre.
- Un conteneur est immuable (modifier un conteneur = créer un nouveau)

Un peu d'histoire...

- 1979 : chroot
- 1999 : jails (Solaris/BSD)
- 2005 : OpenVZ
- Ajout dans le noyau linuxb des namespaces (kernel 2.4.19) et des cgroups (kernel 2.6.24)
- LXC/LXD en 2008
- Docker en 2013, début du DevOps
- Kubernetes en 2014 chez Google, Nomad chez HashiCorp
- 2015 : Docker top 15 GitHub, création de l'Open Container Initiative (OCI)


CNCF Cloud Native Landscape
2021-07-09T05:32:16Z de4e48a3
Overwhelmed? Please see the CNCF Trail Map. That and the interactive landscape are at l.cncf.io
Greyed logos are not open source
App Definition and Development
Database
Streaming & Messaging
Application Definition & Image Build
Continuous Integration & Delivery
Orchestration & Management
Scheduling & Orchestration
Coordination & Service Discovery
Remote Procedure Call
Service Proxy
API Gateway
Service Mesh
Runtime
Cloud Native Storage
Container Runtime
Cloud Native Network
Provisioning
Automation & Configuration
Container Registry
Security & Compliance
Key Management
Special
Kubernetes Certified Service Provider
Kubernetes Training Partner
Platform
Certified Kubernetes - Distribution
Certified Kubernetes - Hosted
Certified Kubernetes - Installer
PaaS/Container Service
Observability and Analysis
Monitoring
Logging
Tracing
Chaos Engineering
Serverless
Members
CD Foundation Landscape
CLOUD NATIVE Landscape
CLOUD NATIVE COMPUTING FOUNDATION
Redpoint
Amplify
l.cncf.io
This landscape is intended as a map through the previously uncharted terrain of cloud native technologies. There are many routes to deploying a cloud native application, with CNCF Projects representing a particularly well-traveled path.

Open Container initiative (OCI)

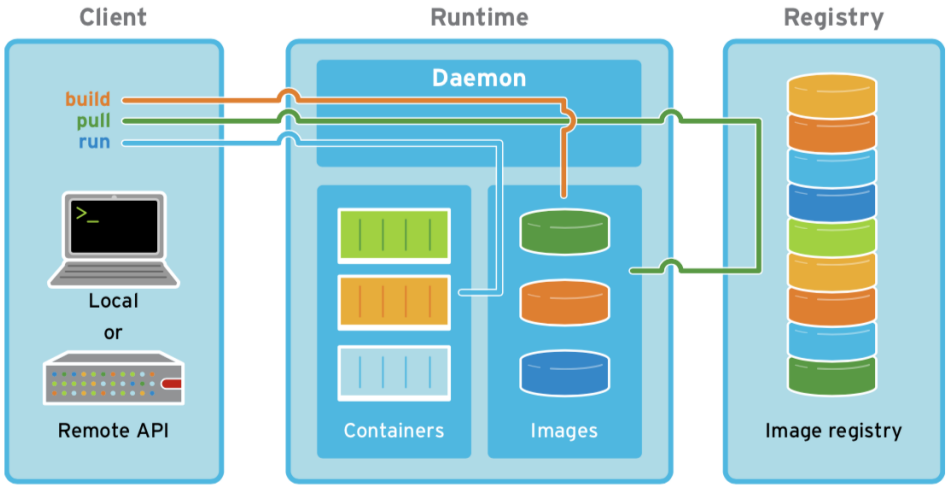
Le processus de démarrage des conteneurs, ainsi que le format de l'image sur le disque, sont définis et régis par des normes.

- Gouvernance ouverte chapeautée par la Linux Foundation pour répondre à la volonté d'avoir un écosystème hétérogène dans K8S.
- Standard pour les runtimes (CRI) et les images de conteneurs (pas les manifestes !)
- Ligne de commande unifiée

```
docker run example.com/org/app:v1.0.0
alias docker=podman
alias docker=singularity
...
```

Vocabulaire

- Runtime : logiciel chargé d'executer le conteneur (docker, lxd, runc, containerd, cri-o, singularity....)
- Image : fichier (ou un ensemble de fichiers) enregistré sur un disque
- Manifeste : Fichier texte, "recette" du conteneur
- Registre : un serveur abritant des images de conteneurs
- Repository : ensemble de registres



Source : Manage Docker containers, by Bachir Chihani and Rafael Benevides

Manifeste

- Plusieurs formats de manifestes : Dockerfile, Singularity...
- Un manifeste est transformé en image via un mécanisme de build (intégré ou non)
- Un conteneur peut être construit "from scratch" ou a partir d'une autre image
- La base d'une image est un OS Linux (Alpine Linux, Busybox, Ubuntu, CentOs...)
- Pas de standards pour les manifestes

```
FROM python:3
RUN mkdir /code
RUN apt-get update -q && apt-get install graphviz libgraphviz-dev libldap2-dev libsasl2-dev -yqq
WORKDIR /code
COPY requirements.txt /code/
RUN pip install -r requirements.txt
COPY . /code/
```

```
docker build -f Dockerfile  -t Container .
```

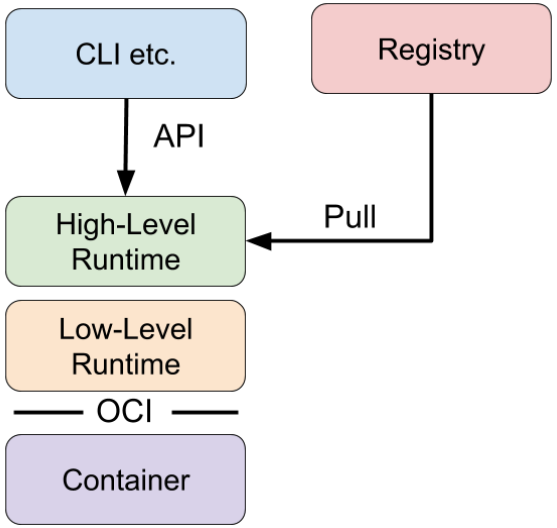
```
singularity build Container.sif Singularity.def
```

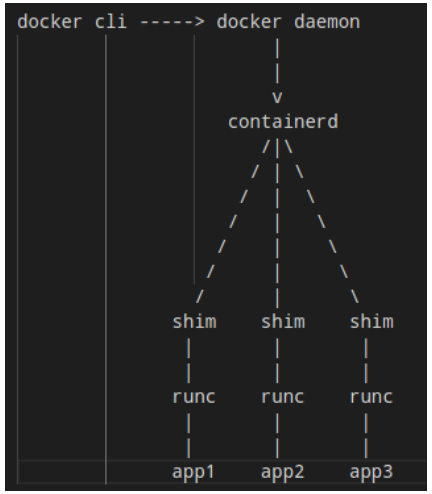
```
buildah bud -f Dockerfile -t Container .
```

Runtimes

- Runtimes bas niveau (proche du kernel) : runc (docker), LXC/LXD, crun, conmon (RedHat), nvidia-docker (Nvidia)
- Runtimes haut niveau (réseau, etc...) : containerd (Docker), CR-IO (Kubernetes), enroot (Nvidia), SmartOs (Samsung), Singularity CRI
- Outils : Docker, Singularity, Podman (RedHat)
- MicroVms : KataContainer (INTEL), Firecracker (AWS), gVisor (google)
- Image builder : buildah, img, orca-build...

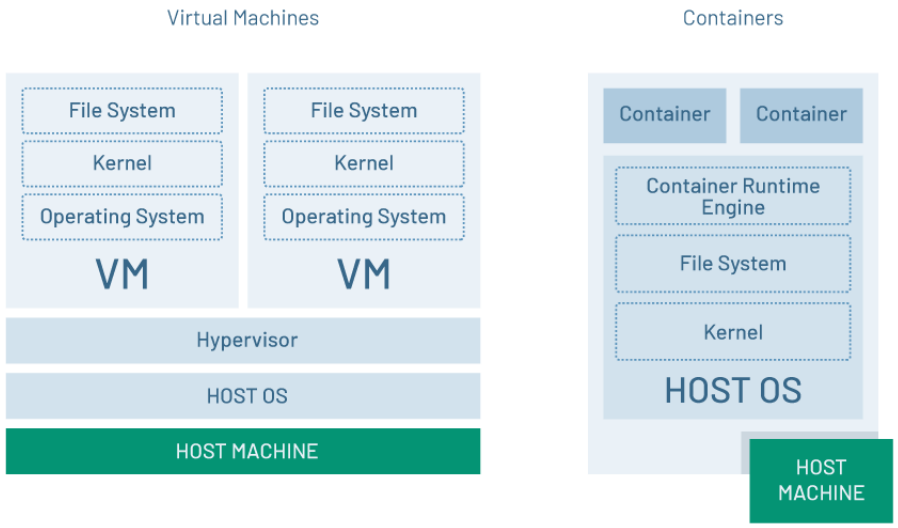
Toutes ces solutions sont interopérables grâce à OCI.





Source : Alterway, Xata7

Isolation et performances



Source : Three Easy Ways to Improve a Container's Performance by Marialena Perpiraki

Isolation et performances

- runtimes de bas niveau en user mode (namespaces) :
  - Temps d'instanciation minimal
  - Isolation faible (proche du matériel)
  - Performances optimales
- runtimes sécurisées (Kata, gVisor) :
  - Isolation forte (équivalent VM)
  - Temps d'instanciation modéré (plus rapide que VMs)
  - Performances dégradées, dépendantes hardware
- Performances liées aux formats d'images
  - Format en couches optimisés pour téléchargement
  - Format fichier optimisé pour le stockage

Isolation et Sécurité

focus sur seccomp

- Seccomp est utilisé par Docker et Singularity
- Permet de filtrer les syscalls depuis les runtimes (liste noire/blanche)

```
~ $ docker info
...
Security Options:
  apparmor
  seccomp
  Profile: default  # default seccomp profile applied by default
...
```

- En désactivant complètement seccomp, tous les syscalls sont autorisés :

```
# Lancer un conteneur sans seccomp
~ $ docker run --rm -it --security-opt seccomp=unconfined alpine sh
/ # reboot  # oops
# Lancer docker avec le profil seccomp par défaut
~ $ docker container run --rm -it alpine sh
/ # reboot  # ouf
```

Isolation et Sécurité

focus sur seccomp

- Lancement d'un conteneur avec un profil seccomp personnalisé

```
# Run avec un profil interdisant le chmod
~ $ docker container run --rm -it --security-opt seccomp=no-chmod.json alpine sh
/ # whoami
root
/ # chmod 777 -R /etc
chmod: /etc: Operation not permitted
```

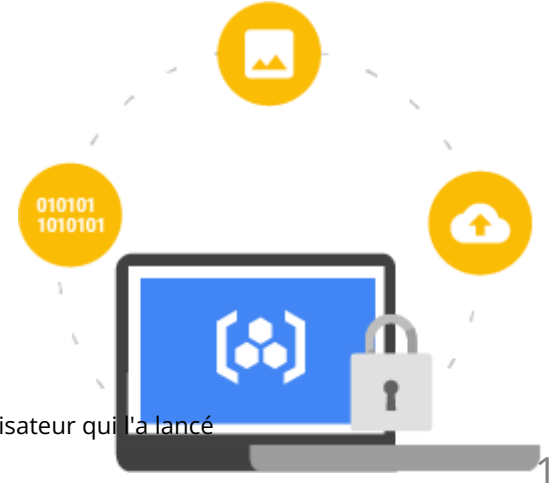
```
{
    "defaultAction": "SCMP_ACT_ERRNO",
    "syscalls": [
        {
            "names": [
                "accept",
                "chown",
                "kill",
                "mmap",
                ...
            ],
            "action": "SCMP_ACT_ALLOW",
                    "args": [],
                    "comment": "",
                    "includes": {},
                    "excludes": {}
        }
    ]
}
```

Source : ITNext

Sécurité

- Docker : daemon root, possibilité d'être root dans un conteneur
- Possibilité d'utiliser AppArmor ou seccomp coté admin pour "verrouiller" l'infra
- Conteneurs dans le namespace "user" :
  - même utilisateur hors du conteneur et dans le conteneur
  - les problématiques d'élévation de priviléges sont reportées sur le noyau linux
  - Attention au SUID...
- Isolation plus ou moins forte (de userNS a VM)
- Vecteur de failles de sécurité logicielle (cf Alpine Linux)

- Vecteur d'attaque pour rootkit (très facile de cacher du code malicieux dans un conteneur)



SetUID : un programme lancé avec le droit “suid” sera exécuté avec les droits du propriétaire du programme et non les droits de l'utilisateur qui l'a lancé

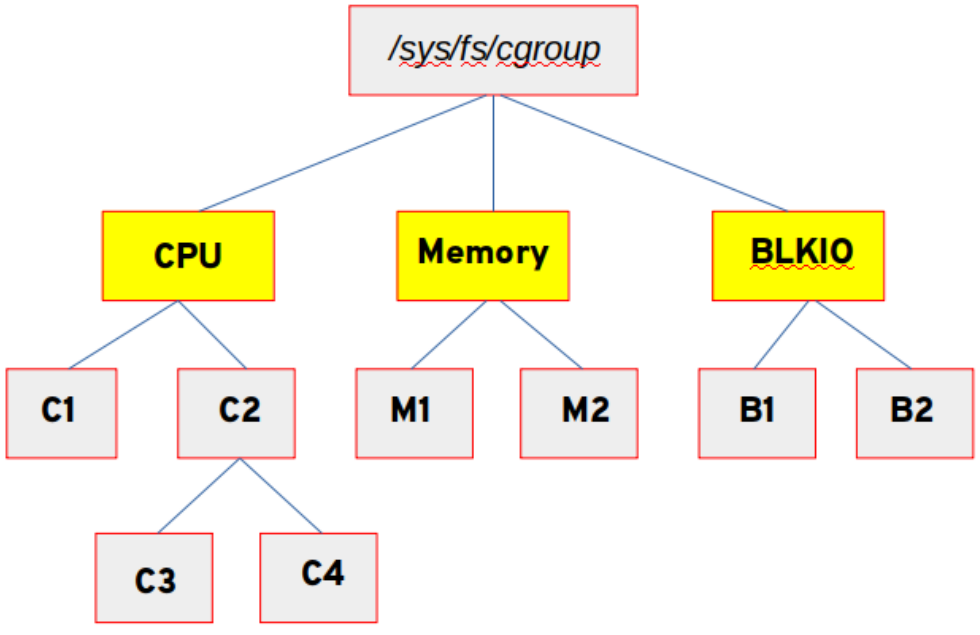
Cgroup

Fonctionnalité du kernel Linux permettant :

- Limitation de ressources (CPU, mémoire, réseau...)
- Gestion des priorités
- Comptes
- Contrôle
- Utilisé dans les schedulers (slurm...)

cgroup(v1)

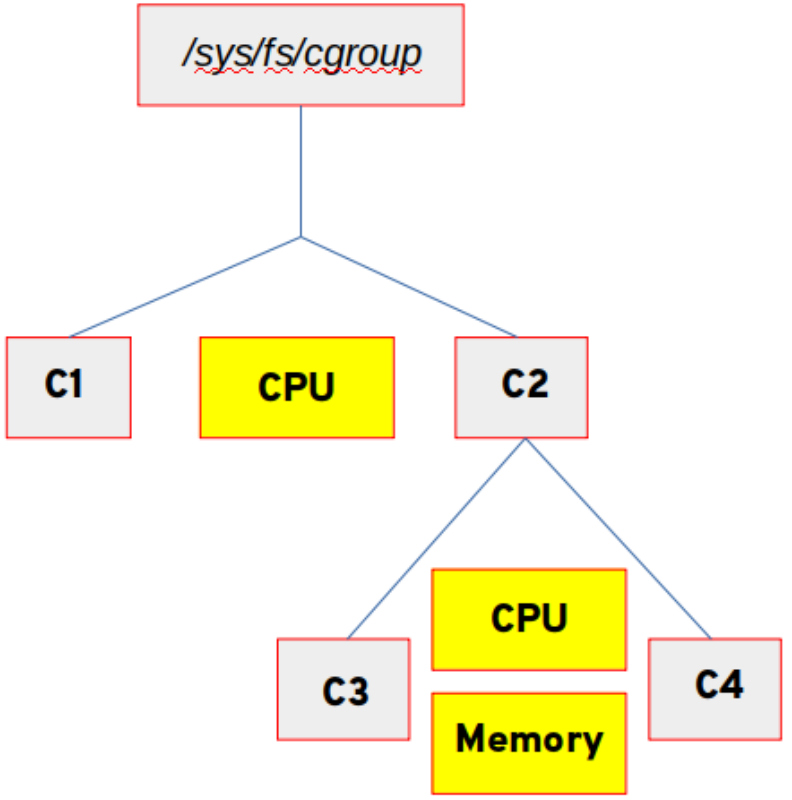
- 13 contrôleurs (cpu, cpuacct, hugetlb, cpuset, freezer, net_cls, net_prio, devices, pids, perf_event, rdma, memory, bulkio)
- Donne des limites aux ressources disponible
- kill ou freeze en cas de dépassement
- Un cgroup comprend un ou plusieurs contrôleurs
- Pb : chaque contrôleur cgroup est indépendant et chaque contrôleur ne peut être utilisé qu'une seule fois



Source : RedHat

cgroup(v2)

- 29 octobre 2019 dans Fedora 31
- Modèle unifié, plus simple
- Un contrôleur peut être utilisé plusieurs fois
- Contrôleurs réécrits (cpu, hugetlb, cpuset, freezer, devices, pids, perf_event, rdma, memory, io)
- Basé sur eBPF (strace, analyse réseau) : plus performant
- Permet les conteneurs non-root avec la même sécurité et les mêmes fonctionnalités (crun, containerd, usernetes...)



Source : RedHat

Partage de conteneurs

Registres publics

- Images vérifiées
  - NVIDIA NGC - images orientées GPU
  - Docker Hub - images officielles
- Libres
  - Docker Hub
  - Singularity Hub
  - Sylabs cloud - images signées
  - Quay.io (scan de sécurité)

Partage de conteneurs

Registres privés

- Gitlab (Registre Docker)
- Harbor (Registre Docker)
- Singularity Hub (Registre Singularity)
- Azure, AWS, etc... (OCI)
- Pour stocker des images OCI dans des registres docker : ORAS

Bonnes pratiques

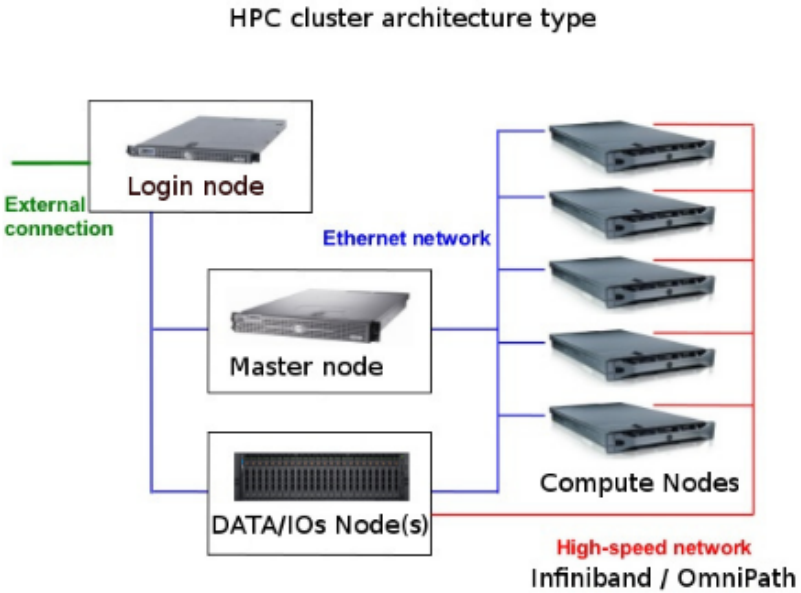
- Partager le manifeste du conteneur avec le conteneur
- Utiliser l'intégration continue pour la génération de conteneurs
- Spécifier toutes les versions exactes des OS et des logiciels dans les manifestes (conda env export, pip freeze, etc....)
- Ne pas installer de logiciels non necessaires
- Utiliser un linter (Hadolint...)
- Taguer les images des conteneurs
- Signer les conteneurs diffusés à l'aide de clés
- Préférer les catalogues d'images vérifiées, ou au moins ceux qui scannent les failles de sécurité
- Utiliser des outils devsecops pour contrôler la sécurité opérationnelle (trivy, falco, ..)

Les conteneurs et le HPC

Architecture HPC

High Performance Computing

- Cluster/grappe de calcul
- Matériel spécifique :
  - Utilisation d'accélérateurs (GPUs, TPUs...)
  - Réseau Infiniband/Omnipath
- Calcul parallèle avec mémoire partagée (MPI)
- Spark, hadoop...
- Orchestration avec un Job Scheduler (Univa, SGE, Slurm, etc...)



Problématiques software HPC

- Besoin de performances et d’optimisations au plus proche du matériel.
- Des jobs qui tournent des semaines, voir des mois ; la maintenance doit être planifiée longtemps en avance,
- Applications scientifiques parfois complexes à compiler, avec de nombreuses dépendances,
- Des noyaux souvent plus vieux que d’ordinaire (nombreux soucis avec la glibc)…,
- Environnement cluster = multi-utilisateurs.
- Support : "J’ai besoin du logiciel X…"

En quoi les conteneurs peuvent nous aider dans le contexte scientifique ?

- Collaboration
  - Diffusion et partage simple de logiciels
  - Portabilité des logiciels
  - Technologie simple à mettre en œuvre
  - Rapidité de mise œuvre
- Répétabilité *
  - Assurance de répétabilité *
  - Assurance de retrouver le même environnement *
  - Assurance de retrouver les même résultats *
- Simplicité
  - Solution identique du laptop au meso-centre
  - Interface graphique

* C'est faux !

Cas d'usage pratique dans la science

- Environnement de travail python prêt à l'emploi transportable sur n'importe quel cluster de calcul
- Les données restent dans les espaces de travail et n'ont pas besoin d'être intégrées au conteneur
- Tout ça de manière sécurisée sans avoir besoin d'être root

Workflow HPC

- Build de l'image du conteneur sur le poste de travail, ou en CI
- Test en local
- Mise a disposition dans un catalogue
- Execution dans un environnement HPC

Répétabilité

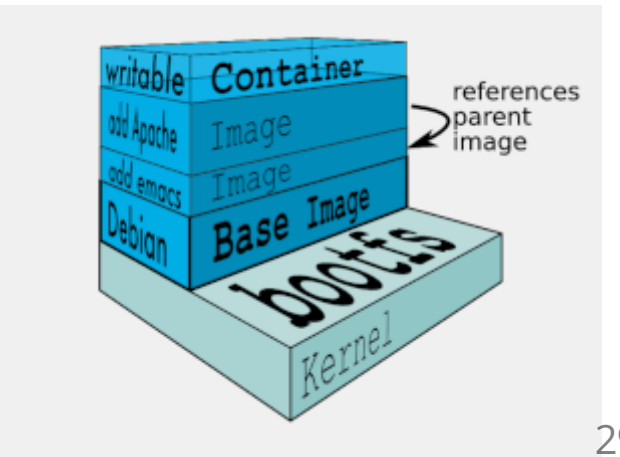
- Le journal Rescience offre la possibilité de soumettre des articles scientifiques qui se doivent d'être reproductible.
- Figer l'environnement d'execution dans un conteneur et le joindre à une publication garantit la répétabilité *, parfois la reproductibilité
- La reproductibilité en informatique nécessite de partager un environnement logiciel *exactement identique*, mais aussi un hardware *exactement identique*....
- Executer un environnement logiciel exactement identique n'est pas garanti par l'utilisation de conteneurs.
  - bonnes pratiques à respecter
  - transparence totale
  - rigueur

* C'est toujours faux !

Docker et le calcul

Un écosystème pas très adapté...

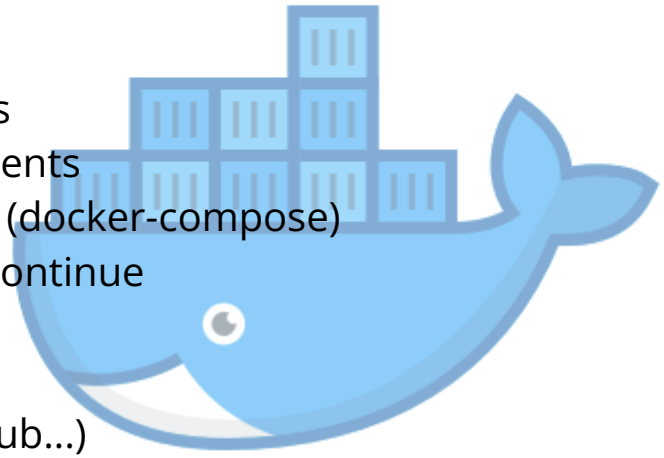
- Docker est adapté pour les micro services (un conteneur, un service), pas très facile de gérer des chaînes de calcul
- Network namespace et compatibilité matériel réseau pour cluster (Intel OmniPath, Infiniband...)
- Aucun support MPI, support GPU non natif
- Image docker : superpositions de couches, pas très portable dans un cluster
- Sécurité :
  - daemon root à installer sur tous les noeuds de calculs...
  - des utilisateurs root dans votre cluster...



Docker et le calcul

... mais néanmoins intéressant

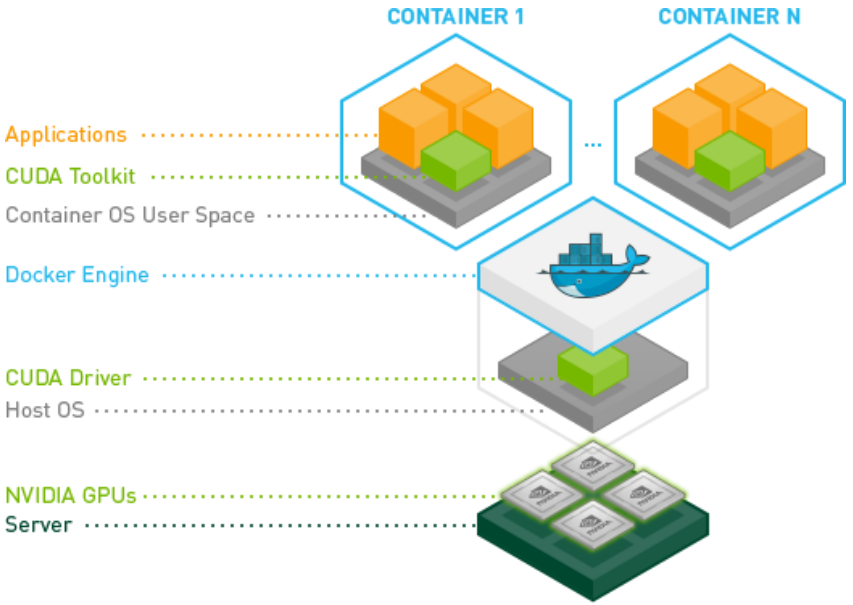
- pour la gestion de bases de données
- pour l'optimisation des téléchargements
- pour la création de stacks logicielles (docker-compose)
- utilisé massivement en Intégration continue
- pour faire du développement
- trés répandu et portable (tous OS)
- pour le catalogue existant (docker hub...)
- sécurisation possible via seccomp
- pour nvidia-docker...

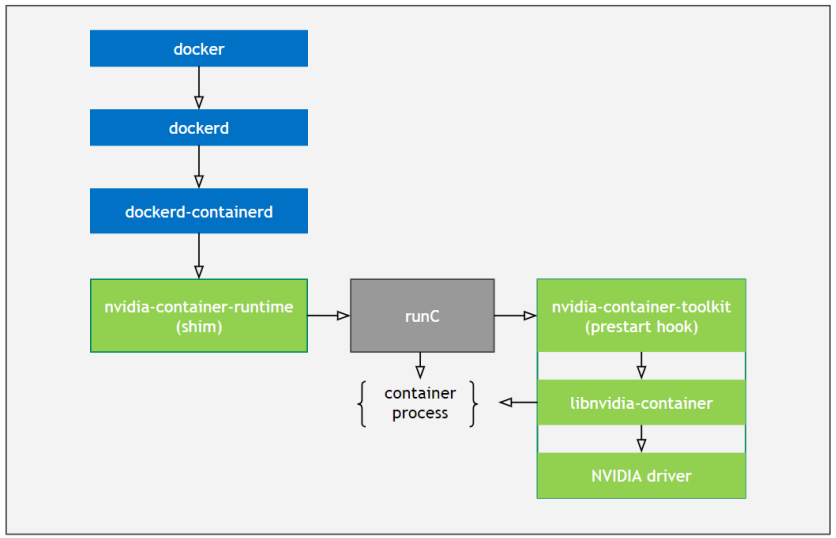


docker

Nivida docker

- Permet d'utiliser des GPUs Nvidia avec Docker
- Utilisable comme runtime et comme toolkit
- Prérequis : kernel version > 3.10, Docker >= 19.03, NVIDIA GPU > Fermi, NVIDIA drivers ~= 361.93





Source NVIDIA

Conteneurs orientés calcul

4 Conteneurs compatibles HPC

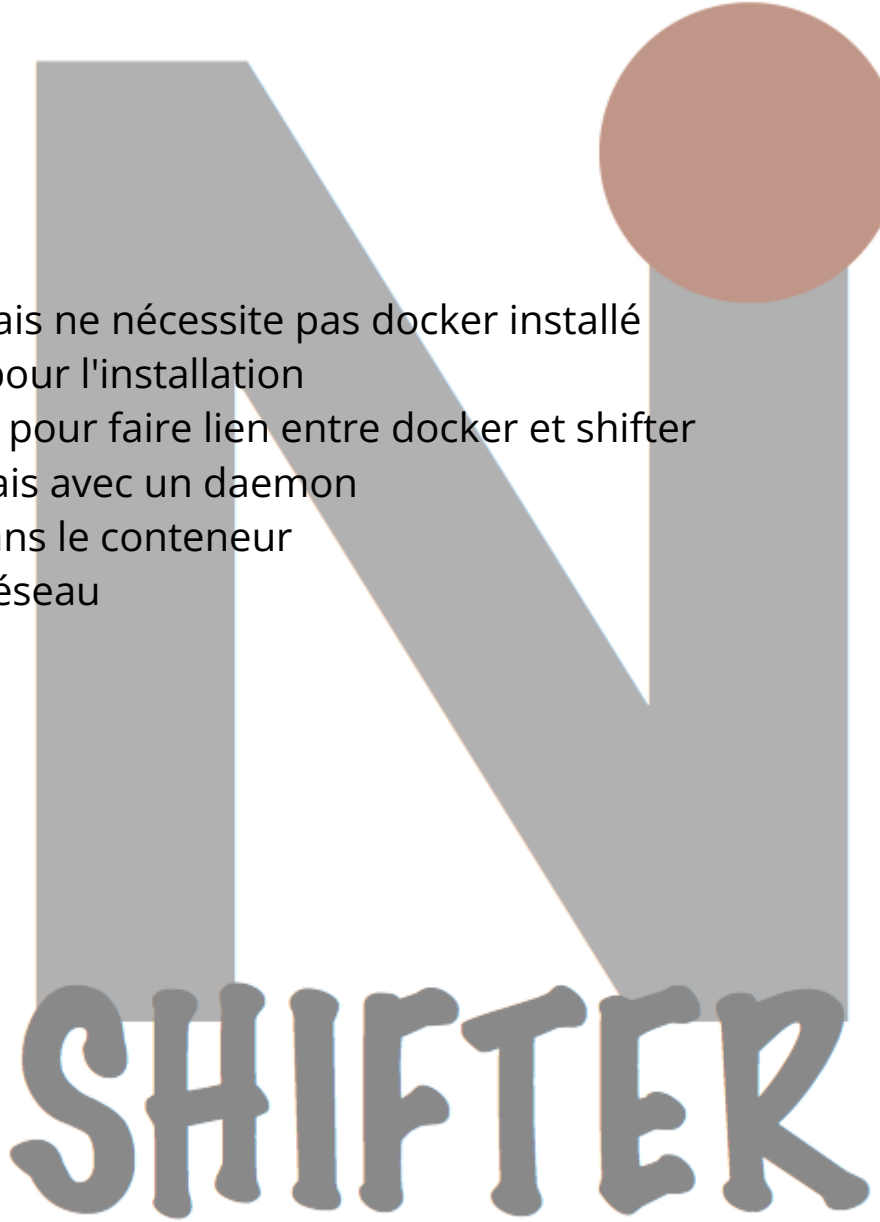
Nom	Dernière Release	Support HW	OCI	ARM	OS	Compatible Scheduler	Contrôle Admin	Privilèges
Docker	26/10/2023	GPU Nvidia	Oui	Oui	MacOs - W$ - Linux	Non	Oui	Root daemon
Charlie-cloud	31/10/2023	MPI - GPU - IB	Non	Non	Linux	Oui	Non	UserNS
Apptainer	17/03/2022	MPI - GPU - IB	Oui	Oui	Linux - MacOs	Oui	Oui	SUID/UserNS
Singularity	13/10/2023	MPI - GPU - IB	Oui	Oui	Linux - MacOs	Oui	Oui	SUID/UserNS
Shifter	01/04/2018	MPI - GPU - IB	Non	Non	Linux	Slurm	Oui	SUID
Nvidia enroot	08/02/2023	GPU - IB	Oui	Non	Linux	Oui	Non	UserNS

Charlie-cloud

- Développé à Los Alamos National Laboratory (LANL)
- Univers docker
- nécessite de modifier la configuration kernel (user.max_user_namespaces, namespace.unpriv_enable=1)
- Packages et compilation simple
- Runtime uniquement (pas de construction d'image)
- conteneurs utilisables sans droits root
- un conteneur = un répertoire
- Support GPU avec drivers dans le conteneur
- Pas de gestion intégrée du réseau
- Écrit en C, peu de ligne de code (autour de 1000)
- Libre et gratuit

Shifter

- Développé au NERSC
- Pas de package
- Images docker converties mais ne nécessite pas docker installé
- Nombreuses dépendances pour l'installation
- Nécessite un Image gateway pour faire lien entre docker et shifter
- utilisable sans droits root mais avec un daemon
- Support GPU avec drivers dans le conteneur
- Pas de gestion intégrée du réseau
- Peu de documentation
- Écrit en C
- Libre et gratuit



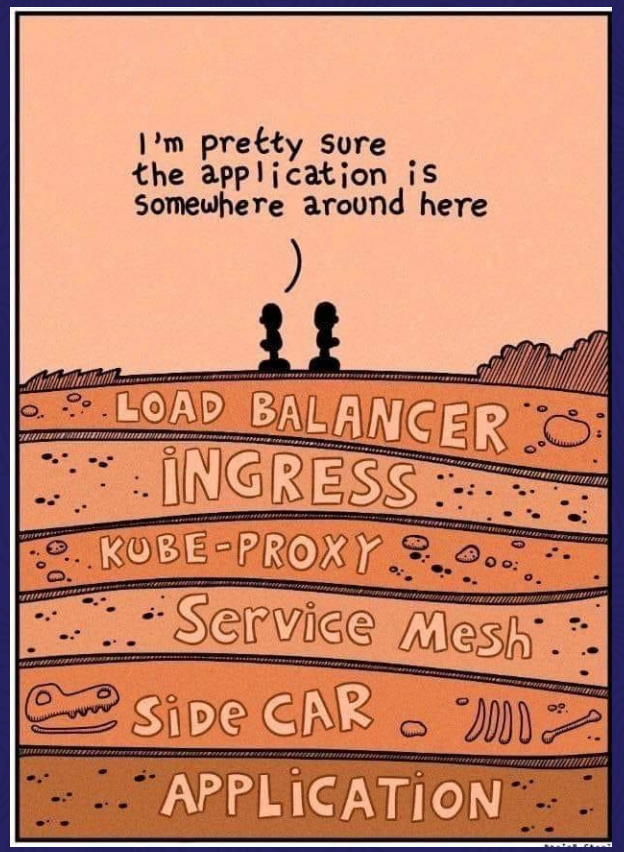
Nvidia enroot

Enroot peut être considéré comme un chroot non privilégié amélioré. Il utilise les mêmes technologies sous-jacentes que les conteneurs mais supprime une grande partie de l'isolement qu'ils procurent tout en préservant la séparation du système de fichiers.

- Pratique le principe KISS
- Standalone (pas de daemon)
- Tourne en namespace user (pas de binaire setuid, cgroups, configuration par utilisateur...)
- Facile à utiliser (simple image format, scriptable, root remapping...)
- Pas à peu d'isolation
- Configuration administrateur et utilisateur
- Import rapide d'images Docker (vitesse de 3x à 5x sur des grosses images)
- Images SquashFS
- Support GPU Nividia avec libnvidia-container
- Packages DEB et RPM, make install...

```
# Import and start an Ubuntu image from DockerHub
$ enroot import docker://ubuntu
$ enroot create ubuntu.sqsh
$ enroot start ubuntu
```

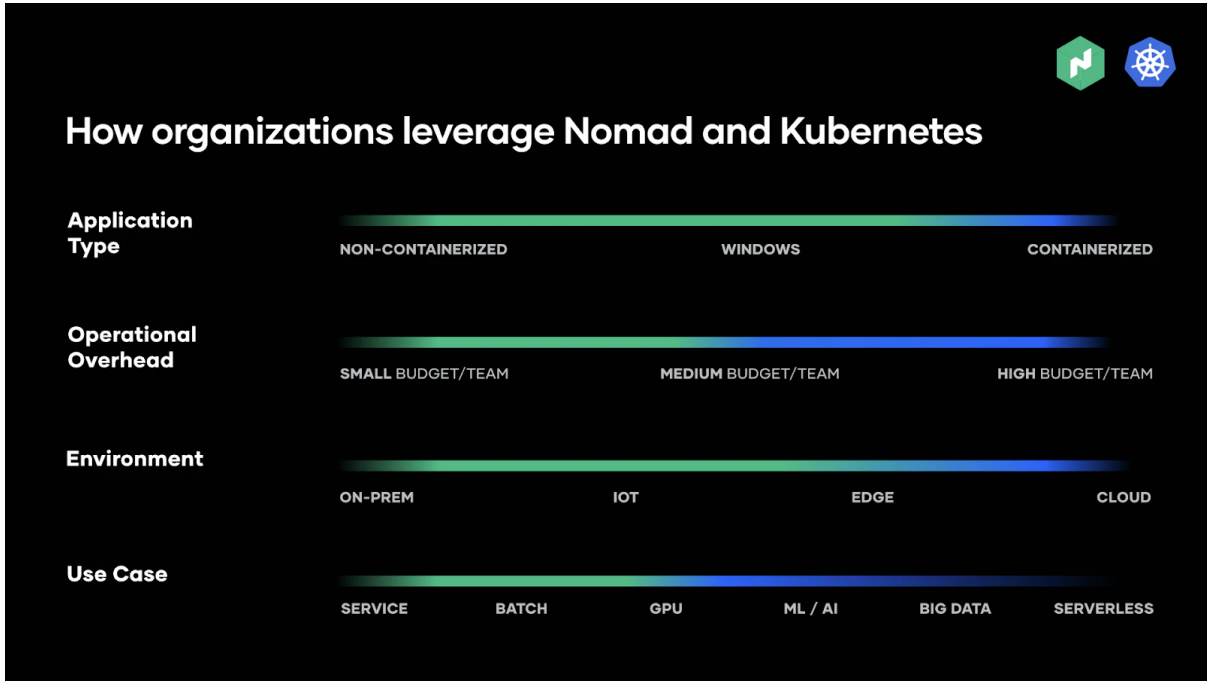
Orchestration et scheduling



Orchestrateur de conteneur

Un Orchestrateur est un système permettant d'automatiser le déploiement, la mise à l'échelle et la gestion des applications conteneurisées

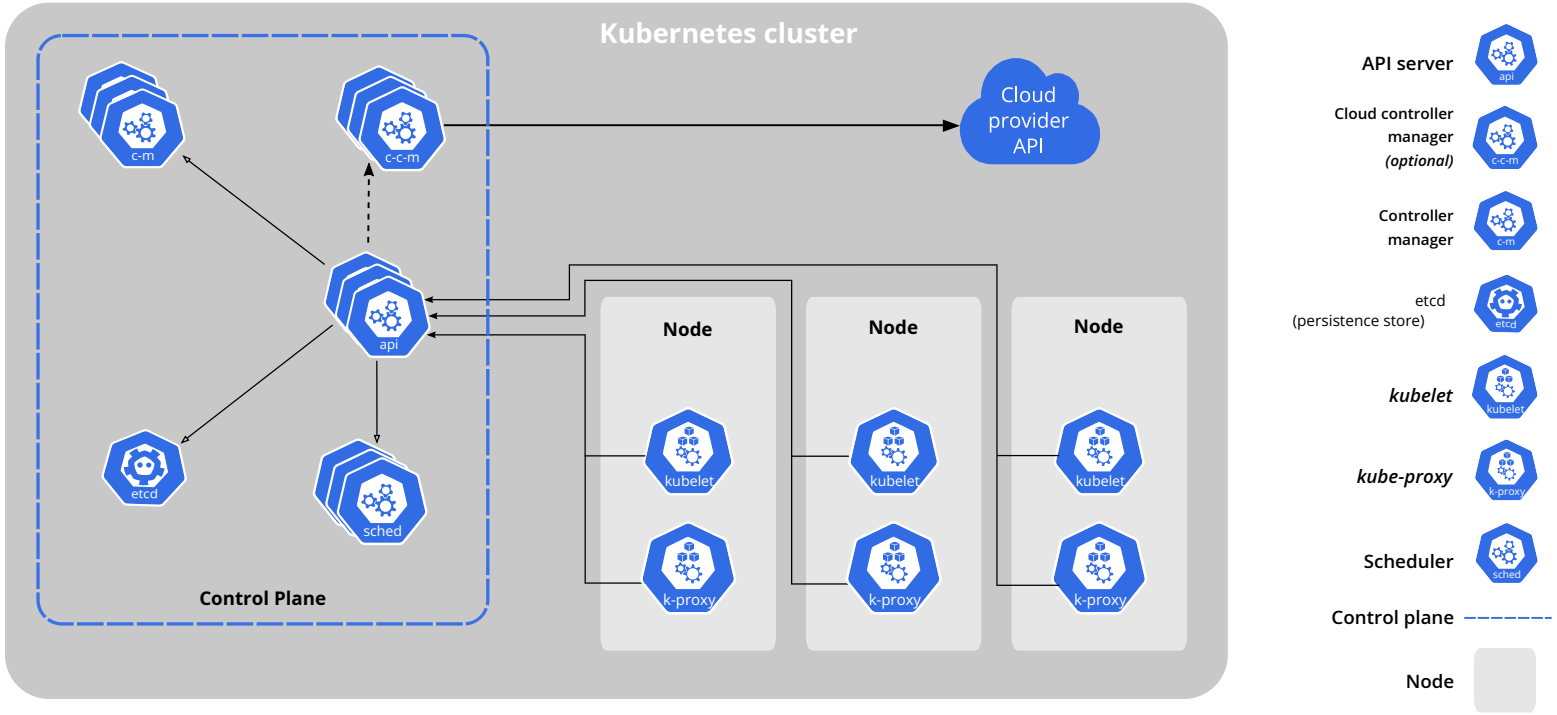
- Approche microservice : les conteneurs qui composent une application sont regroupés dans des unités logiques (pods) pour en faciliter la gestion et la découverte
- Deux acteurs principaux : Kubernetes (The Linux Foundation) et Nomad (Hashicorp)



Kubernetes

- Kubernetes est orienté microservice et web
- fournit toutes les fonctionnalités nécessaires à l'exécution d'applications basées sur des conteneurs, notamment la gestion des clusters, le scheduling, la découverte de services, la surveillance, la gestion des secrets, le stockage etc...
- dans une API unique
- ouvert aux runtime OCI (containerd, CRI-O, Singularity)
- Gestion d'accélérateurs avec framework device plugins
- Pas de gestion de batch dans Kubernetes, ce qui s'en rapproche le plus est la notion de Job
  - Un ensemble de pods qui exécutent une tâche et s'arrêtent.
  - Le job lance un nouveau pod si un pod échoue ou est supprimé.
  - Possibilité de lancer plusieurs pods en parallèle (mais pas avec MPI).
- Singularity-CRI permet le support des GPU NVIDIA en device plugin

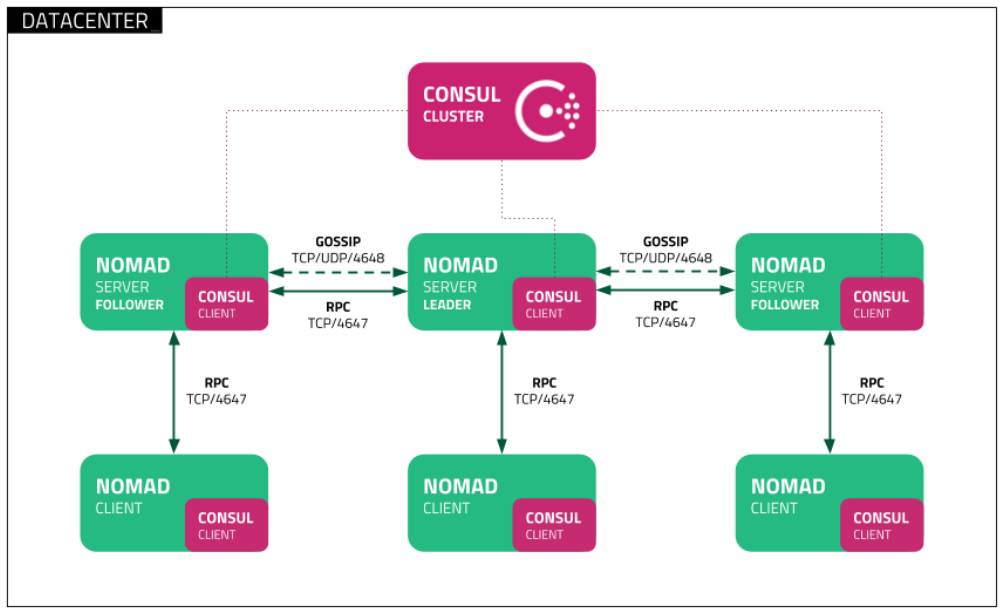
Kubernetes


Kubernetes cluster
c-m
c-c-m
Cloud provider API
api
etcd
sched
Control Plane
Node
Node
Node
kubelet
kubelet
kubelet
k-proxy
k-proxy
k-proxy
API server
Cloud controller manager (optional)
Controller manager
etcd (persistence store)
kubelet
kube-proxy
Scheduler
Control plane
Node

Nomad

- Infrastructure as cloud déclaratif
- Version 1.0.2
- Kubernetes fournit toutes les fonctionnalités nécessaires à l'exécution d'applications basées sur des conteneurs, notamment la gestion des clusters, le scheduling, la découverte de services, la surveillance, la gestion des secrets, etc...
- Nomad ne fait que de la gestion de cluster et du scheduling

HashiCorp Nomad



Nomad

HashiCorp
Nomad

- S'intègre avec Consul (découverte et maillage de services, réseau), Terraform (déploiement) et Vault (gestion de secrets)
- Nomad supporte la fédération native multi-region et multi-datacenter
- Nomad intègre la gestion des GPU/TPU/FPGA, support Spark
- Nomad permet d'orchestrer des VMs ou des applications batchs en plus des conteneurs
- Scalabilité : Kubernetes est limité a 5000 nœuds et a 100 pods par nœuds. Instances de Nomad de plus de 10 000 nœuds en production.
- Nomad est entièrement et uniquement développé par des employés d'HashiCorp, en open source mais sans support communautaire
- Nomad est compatible Linux, MacOs et Windows, Kubernetes n'est supporté que sur Linux
- Nomad distribué sous la forme d'un binaire de 75Mb (pour client et serveur), Kubernetes demande le déploiement de nombreux conteneurs

Désavantages de Nomad

- Définition des ressources manuelle
- Auto scaling pas encore disponible
- Développement très rapide, avec une certaine tendance à la dépréciation sauvage et sans préavis
- Un certains nombre de fonctionnalités payantes

HashiCorp
Nomad

Conclusion

Les conteneurs et l'architecture micro service ont permis le developpement du mouvement DevOps :

- Responsabilités déportées sur le developpement
- Fragilité en production
- Langage commun entre dev et exploitation
- Moyen pour définir un environnement stable, reproductible et portable

Questions

Retrouvez nous sur

- Rocket Chat : #computeops
- Citadel CNRS