Docker fue creado a raiz de la tecnología LXC (Linux Container). Docker utiliza un daemon (Docker engine) que gestiona los contenedores. En cada contenedor existe un OS muy liviano basado en el kernel de Linux. Tiene muy poquitas opciones, pero permite ejecutar comandos como apt install, ls, pwd, etc...

Por otro lado, una máquina virtual siempre necesita asignarle los recursos (RAM por ejemplo) antes de levantarla, pudiendo desperdiciar mucha memoria. En cambio, los contenedores se les asignan recursos hardware bajo demanda, esto quiere decir que cuando necesitan más RAM la piden y cuando no la necesitan la liberan de nuestra máquina hardware.

Así que podemos decir que: VM (Tiene un OS completo y hay que darle los recursos hardware específicos antes de levantar una VM)

Docker (OS liviano. Docker engine gestiona los recursos hardware de OS host en base a la demanda)

Por lo general será más optimo en cuando a gestión del hardware usar contenedores siempre y cuando necesitemos el contenedor como envoltorio para ejecutar una aplicación o servicio, ya que consume los recursos del nuestro hardware en base a la demanda. Por otro lado, si lo que necesitamos en un OS completo con todas sus opciones, no queda más remedio que usar una VM aunque desperdicie más recursos.