Gegeben: $\{P_{1,\exp}, P_{2,\exp}, \ldots, P_{N,\exp}\}$ mit $P_{i,\exp} = (x_{i,\exp}; y_{i,\exp})$

$$\sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - y_{i,\mathrm{cal}}\right)^2 \to \min \text{ mit } y_{i,\mathrm{cal}} = a_1 x_{i,\exp} + a_0$$

Also, a_1 und a_0 willst Du berechnen, die sind jetzt noch unbekannt. Also, nun die notwendige Bedingung für das Vorliegen eines Minimums aufschreiben:

$$F_0(a_0, a_1) = \frac{\partial}{\partial a_0}\sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right)^2 = 2\sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right)\frac{\partial}{\partial a_0}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right) = 0$$

$$F_1(a_0, a_1) = \frac{\partial}{\partial a_1}\sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right)^2 = 2\sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right)\frac{\partial}{\partial a_1}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right) = 0$$

Dies sind die beiden Bedingungen, oder, wenn Du die Differenziationen der inneren Funktionen noch durchführst:

$$-2\sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right) = 0 \quad\Leftrightarrow\quad \sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right) = 0$$

$$-2\sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right)x_{i,\exp} = 0 \quad\Leftrightarrow\quad \sum_{i=1}^{N}\left(y_{i,\exp} - a_1 x_{i,\exp} - a_0\right)x_{i,\exp} = 0$$

Das ist ein Gleichungssystem in den beiden Unbekannten a_1 und a_0, und weil sie linear vorkommen, ist es ein lineares, wie Du weißt. Weitere Umformung ergibt:

$$\sum_{i=1}^{N} y_{i,\exp} - a_1\sum_{i=1}^{N} x_{i,\exp} - N\,a_0 = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_{i,\exp} y_{i,\exp} - a_1\sum_{i=1}^{N} x_{i,\exp}^2 - a_0\sum_{i=1}^{N} x_i = 0$$

Nun kannst Du viele Summen abkürzend durch eine eigene Symbolik schreiben und Du wirst auch viele Mittelwerte erkennen gemäß:

$$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{i,\exp}\,,\quad \bar{y} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} y_{i,\exp}\quad \overline{x^2} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{i,\exp}^2$$

Dann vereinfacht sich schreibtechnisch das lin. Gl.-System zu:

$$\bar{y} - a_1\bar{x} - a_0 = 0$$

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{i,\exp} y_{i,\exp} - a_1\overline{x^2} - a_0\bar{x} = 0$$

Es sollte die Lösungen haben:

$$a_0 = \frac{\bar{y}\overline{x^2} - \frac{\bar{x}}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{i,\,\exp} y_{i,\,\exp}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$$

$$a_1 = \frac{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{i,\,\exp} y_{i,\,\exp} - \overline{xy}}{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$$

Du kannst auch noch eine Abkürzung für diese Summe der Produkte $x_{i,\,\exp} y_{i,\,\exp}$ finden, und meines Erachtens gibt's da auch Namen für in der Ausgleichsrechnung.

Die Rechnung hier basiert auf der Annahme, dass die Punkte gleich stark gewichtet sind. Ist die Bedingung nicht gegeben, so musst Du irgendwie die Standardabweichungen als Gewichtungsfaktoren mit einfließen lassen. Weiß aber nicht genau, wie das geht. Ich glaube aber, dass die obige Formel das ist, was Du gesucht hast.

Diese Summen kannst Du ja mit C Sharp oder Java bequem berechnen, denk ich mal.